

К 200-летию Харьковского университета
Серия монографий и учебных пособий

В.В.Ульянов

СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Часть пятая



Харьков 2012

К 70-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов

**СБОРНИК ОБЗОРОВ И
СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ
ТЕОРИИ**

(с соавторами и без)

V

НЕЛИНЕЙНЫЕ НУЛЕВЫЕ КОЛЕБАНИЯ
ТЕРМОДИНАМИКА ПАРАГАЗА
ОСОБЫЙ ПОДХОД В ВКБ-МЕТОДЕ
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В БОЗЕ-ГАЗЕ
РАЗМЫТИЕ ГРАНИЦ МЕТАЛЛА
ТЕПЛОЕМКОСТЬ ДВУМЕРНЫХ ГАЗОВ
ЛОКАЛЬНЫЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Харьков 2012

УДК 530.145

У 51

У 51 **Ульянов В.В.** Сборник обзоров и статей по квантовой теории (с соавторами и без). Часть V / В.В.Ульянов. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2012. - 68 с.

Сборник содержит несколько обзоров и статей, в которых затрагиваются различные вопросы квантовой теории.

В пятую часть входят статьи, посвященные нелинейным нулевым колебаниям, термодинамике парагаза, особому подходу в ВКБ-методе, фазовым переходам в бозе-газе, размытию границ металла, теплоемкости двумерных газов, локальным связанным состояниям и другим вопросам.

Сборник продолжает серию изданий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и 70-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

Издается по решению кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица от 17 мая 2011 года (протокол № 11)

УДК 530.145

ПРЕДИСЛОВИЕ

В сборник включены некоторые обзоры и обзорные статьи, а также небольшие статьи, представляющие для автора особый интерес.

Большая часть этих публикаций написана совместно с моими коллегами по кафедре теоретической физики.

Пятая часть содержит краткие сообщения, посвященные нелинейным нулевым колебаниям, термодинамике парагаза, особому подходу в ВКБ-методе, фазовым переходам в бозе-газе, размытию границ металла, теплоемкости двумерных газов, локальным связанным состояниям и другим вопросам.

Сборник посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

На последней странице помещены изображения обложек физических журналов, в которых публиковались обзоры и статьи из данного сборника.

Благодарю Александра Михайловича Ермолаева за внимательное отношение к работам автора, за постоянную помощь советами и редкой литературой.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

5.74

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

В. В. УЛЬЯНОВ, НГУЕН ДЫК ТЬЕН

О ВЛИЯНИИ РАЗМЫТИЯ ГРАНИЦЫ МЕТАЛЛА НА СВОЙСТВА
ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

В работах [1—3] исследовались термодинамические свойства электронов проводимости ограниченного металла в модели непроницаемых стенок. Представляет интерес рассмотреть влияние размытия границы на электронные свойства. На примере термодинамических величин электронов с квадратичным законом дисперсии в слое металла иллюстрируется, какие изменения вносит учет строения границы уже в простых потенциальных моделях.

Правила квантования энергии, относящейся к перпендикулярному слою металла направлению, для дискретной части спектра с учетом размытия границы можно записать так:

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} [n - \gamma(\varepsilon_{\perp})]^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где L — толщина слоя атомных остатков, m — эффективная масса электрона, а «функция размытия» γ учитывает отклонение условия квантования от условия в обычной модели непроницаемых стенок, когда $\gamma = 0$. Вычисление энергетической плотности электронных состояний ν приводит к следующему точному выражению:

$$\nu(\varepsilon) = \nu_0(\varepsilon) \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} \frac{\hbar}{L \sqrt{2m\varepsilon}} [1 - 2\gamma(\varepsilon)] + \frac{\hbar}{L \sqrt{2m\varepsilon}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\sin [2\pi \ln(\varepsilon)]}{l} \right\}, \quad (2)$$

где $\nu_0(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} V m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ — плотность состояний в неограниченном случае, V — объем, а $n(\varepsilon) = \frac{L \sqrt{2m\varepsilon}}{\pi \hbar} + \gamma(\varepsilon)$. Как видно из (2), поверхностная часть плотности состояний существенно зависит от γ , а период осцилляций слабо чувствителен к поверхностным деталям.

Функция размытия $\gamma(\varepsilon)$ может быть рассчитана в рамках конкретной модели эффективного потенциала, учитывающего детали структуры границы. Явный вид функции размытия для простейших моделей:

$$а) \quad \gamma = \frac{2\delta}{\pi \hbar} \sqrt{2m\varepsilon}, \quad б) \quad \gamma = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{\varepsilon}{U_0}} + \frac{2\delta}{\pi \hbar} \sqrt{2m\varepsilon}. \quad (3)$$

Здесь случай „а“ соответствует непроницаемым стенкам, находящимся на расстоянии δ от слоя атомных остатков, а случай „б“ относится к модели конечной прямоугольной потенциальной ямы глубиной U_0 и шириной, превосходящей толщину слоя на 2δ . Например, в случае „а“ при учете условия электронейтральности металла функция размытия $\gamma = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}}$.

В качестве примера расчета с помощью выражения (2) приводится результат для теплоемкости вырожденного электронного газа

$$C = C_0 \left\{ 1 - \frac{\pi}{4\kappa_F^0 L} \left[1 - 4\gamma(\varepsilon_F^0) + \frac{2}{\varepsilon_F^0} \int_0^{\varepsilon_F^0} \gamma(\varepsilon) d\varepsilon \right] - \frac{3}{\kappa_F^0 L} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\sin [2\pi \ln(\varepsilon_F)]}{l} \Psi'' [2\pi^2 \ln'(\varepsilon_F) T] + O(L^{-2}) \right\}, \quad (4)$$

где теплоемкость $C_0 = \frac{\pi^2}{3} T \nu_0(\varepsilon_F^0)$ и энергия Ферми ε_F^0 относятся к неограниченному случаю, T — температура, $\hbar \kappa_F^0 = \sqrt{2m\varepsilon_F^0}$, а $\Psi(x) \equiv \frac{x}{\operatorname{sh} x}$. Сравнение с результатом работ [2, 3], где $\gamma = 0$, показывает, что учет γ очень существен для плавной поверхностной добавки, которая для $\gamma = 0$ отрицательна, а для модели „а“, например, положительна. Амплитуда и период осцилляций изменяются незначительно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] И. М. Лифшиц, А. М. Косевич. Изв. АН СССР, сер. физ., **19**, 395, 1955.
 [2] Ф. И. Ицкович. Изв. вузов СССР, Физика, № 2, 13, 1961. [3] С. С. Недо-
 резов. ЖЭТФ, **51**, 869, 1966.

Харьковский госуниверситет
 имени А. М. Горького

Поступило в редакцию
 10 июля 1973 г.,

УДК 678.02 : 66.097

В. Г. ЕМЕЛЬЯНОВ, Б. М. КОВАЛЬЧУК, Ю. Ф. ПОТАЛИЦЫН

НЕКОТОРЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИСКРОВОГО РАЗРЯДА, ИНИЦИИРУЕМОГО ПУЧКОМ ЭЛЕКТРОНОВ

В работах [1—5] обнаружено, что при инжекции в газонаполненный разрядный промежуток пучка быстрых электронов могут иметь место несколько форм объемного либо искровой разряды. В настоящей статье описаны характеристики запускаемого пучком электронов искрового разрядника на напряжение до 250 кВ.

Схема испытания разрядника описана в [4]. На исследуемый разрядник с межэлектродным зазором $1 \div 20$ мм (диаметр плоских электродов 80 мм) разряжалась однородная линия с изменяемым волновым сопротивлением $\rho = 2 \div 40$ ом. Разрядник заполнялся азотом до давлений $1 \div 16$ атм. Линия заряжалась от импульсного трансформатора до максимального напряжения за время $(0,25 \div 0,5) \cdot 10^{-6}$ сек. Иницирующий электронный пучок, формируемый наносекундным ускорителем прямого действия с холодным катодом, вводился в исследуемый разрядник через один из электродов, представляющий собой коллиматор с большим числом отверстий диаметром 4 мм, закрытых диафрагмой из титановой фольги толщиной 50 мк.

Параметры иницирующего электронного пучка: максимальная энергия электронов (за титановой фольгой толщиной 50 мк) 180 кэВ; амплитуда тока $i_0 = 1 \div 100$ а; длительность импульса тока $t_0 = 5 \cdot 10^{-9}$ сек; сечение пучка 5 см². Типичные осциллограммы приведены на рис. 1.

Импульс электронного тока в разрядном промежутке, зарегистрированный цилиндром Фарадея, показан на рис. 1, а. На рис. 1, б—г показаны осциллограммы тока с низкоомного шунта, установленного в разрезе наружной трубы формирующей линии непосредственно у исследуемого разрядника. Осциллограмма 1, б иллюстрирует ток несамостоятельного разряда, иницированного электронным пучком, при зарядном напряжении U значительно меньшем статического пробивного $U_{ст}$ (искровой пробой при этом не происходит). На осциллограммах 1, в, г видно, что через некоторое время t_3 после инжекции пучка происходит резкий рост разрядного тока, соответствующий искровой пробежке разрядника.

На рис. 2 приведены зависимости $t_3(U)$ при различных токах инжекции i_0 . При уменьшении i_0 от 50 (кривая 1) до 10 а (кривая 3) t_3 уменьшается. При $i_0 = 1$ а (кривая 4) и 10 а $t_3 = 10^{-9}$ сек при $E/p = 28$ в/см · тор. Диапазон управления разрядником составлял при этом $U_{ст}/U_{min} \approx 2$.

Время запаздывания t_3 зависит от полярности напряжения на разрядном промежутке. На рис. 3 приведены зависимости $t_3(U)$ при инжекции пучка через катод разрядника — кривая 1 и через анод — кривая 2. Минимальное $t_3 = 10^{-9}$ сек во втором случае достигается при значительно

(~на 30%) большем напряжении, а диапазон управления разрядника при этом уменьшается. Если предположить, что искровой разряд в этих условиях имеет стримерный характер, то скорость стримера достигала $v_c = 10^9$ см/сек.

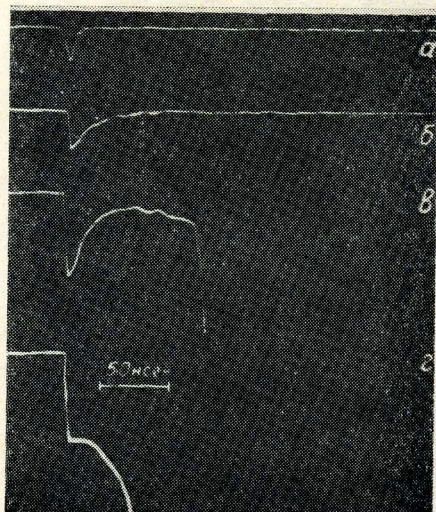


Рис. 1. Типичные осциллограммы импульсов тока

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

1.75

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

$$E(r) = E_0 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\lambda r)^n}{(2n)!!} = \frac{8I_s \dot{x}(w)}{c} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\lambda r)^n}{(2n)!!}. \quad (7)$$

Ряд в выражении (7) быстро сходится, и сумма его равна $e^{-\kappa \lambda r}$, где $\kappa \approx 0,91$. Зная $E(r)$ на поверхности, нетрудно получить $E(r, z)$ для любой точки полупространства

$$E(r, z) = E(r) \cdot e^{-z/\delta} = \frac{8I_s \dot{x}(w)}{c} \cdot e^{-\kappa \lambda r} \cdot e^{-z/\delta}. \quad (8)$$

При этом суммарные потери на микровихревые токи определяются интегралом по объему.

$$P = \int_v \frac{E^2}{\rho} \cdot dv = \frac{64I_s^2 \dot{x}^2(w)}{c^2 \rho} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-2\kappa \lambda r} \cdot e^{-2z/\delta} \cdot dr dz d\varphi. \quad (9)$$

Для случая пластинки толщиной d выражение (9) примет вид

$$P = \frac{64\pi I_s^2 \dot{x}^2(w) \mu \delta}{\kappa c^2 \rho} \int_0^d e^{-2z/\delta} dz = \frac{32\pi I_s^2 \dot{x}^2(w) \mu \delta^2}{\kappa c^2 \rho} \left(e^{-\frac{2d}{\delta}} - 1 \right). \quad (10)$$

Приравнявая энергию внешнего поля по перемещению границы на расстояние Δx со скоростью \dot{x} потерям на вихревые токи, получим

$$\frac{32\pi I_s^2 \dot{x}^2(w) \mu \delta^2}{\kappa c^2 \rho} (1 - e^{-2d/\delta}) = 2I_s (H - H_0) \dot{x}(w) \Delta x. \quad (11)$$

Сопоставляя (11) с (2), видим, что в случае массивных образцов параметр вязкого затухания β связан следующей зависимостью с d :

$$\beta = \frac{32\pi I_s^2 \mu \delta^2}{\kappa c^2 \rho \Delta x} (1 - e^{-2d/\delta}). \quad (12)$$

При малых d полученное выражение совпадает с (1), в чем нетрудно убедиться, разложив $\exp(-2d/\delta)$ в ряд, а при $d \rightarrow \infty$ согласно (12) подвижность (g) экспоненциально стремится к некоторому значению, определяемому лишь значением I_s .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. С. Покатилов, И. М. Пузей. ЖЭТФ, 63, 1, 205, 1972. [2] Н. Б. Широкова, Е. Н. Ильичева, А. С. Сигов, А. Г. Шишков. Изв. АН СССР, сер. физ., 36, 6, 1158, 1972. [3] Ch. Kittel, I. Galt. Solide State Phys., 3, 437, 1956; перевод в сб. «Магнитная структура ферромагнетиков», 459, ИЛ, М., 1959. [4] В. М. Рудяк. УФН, 101, 3, 429, 1970. [5] G. Montalenty. Z. Angew. Phys., 28, 5, 295, 1970.

Красноярский госуниверситет

Поступило в редакцию
20 мая 1974 г.

УДК 536.7

В. В. УЛЬЯНОВ, С. С. СОКОЛОВ

О ТЕПЛОЕМКОСТИ ДВУМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ ИДЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ

1. В работе [1] при рассмотрении термодинамических свойств квантовых идеальных газов в двумерном случае не учитывался спин частиц и не принималось во внимание различие между массами фермионов и бозонов, что привело автора к выводу о совпадении теплоемкостей ферми- и бозе-газов при одинаковом числе частиц и о независимости теплоемкости смеси фермионов и бозонов от ее состава. На самом деле, как показано в настоящей работе, в двумерном случае теплоемкости ферми- и бозе-газов имеют одинаковый температурный ход и сильную зависимость от спинов и масс частиц. Для всех температур в газах с одинаковым числом частиц теплоемкости совпадают только при определенном соотношении спинов и масс, а теплоемкости на одну частицу — при некотором отношении числа частиц. Это характерно, однако, лишь для этих двух случаев парагазов.

2. Для квантовых идеальных газов, состоящих из частиц со спином s и массой m , обычные методы квантовой статистики [2] дают для средних значений энергии и числа частиц в двумерном случае

$$E = gmAT^2 \int_0^{\infty} \frac{xdx}{e^{\frac{x-\mu}{T}} \pm 1}, \quad N = \pm gmAT \ln(1 \pm e^{\mu/T}), \quad (1)$$

где верхний знак соответствует ферми-газу, нижний — бозе-газу, $g = 2s + 1$, $A = \frac{\sigma}{2\pi \hbar^2}$, σ — площадь. Используя тождество

$$\int_0^{\infty} \frac{xdx}{\xi e^x + 1 (\xi > 0)} = \int_0^{\infty} \frac{xdx}{(\xi + 1)e^x - 1} + \frac{1}{2} \left[\ln \left(1 + \frac{1}{\xi} \right) \right]^2 \quad (2)$$

и исключая химический потенциал μ из уравнений (1), получаем

$$E^F = E_0^F + NT \varphi \left(\frac{N}{gmAT} \right), \quad E_0^F = \frac{N^2}{2gmA}, \quad (3)$$

$$E^B = NT \varphi \left(\frac{N}{gmAT} \right), \quad \varphi(z) \equiv \frac{1}{z} \int_0^{\infty} \frac{xdx}{e^x - 1 - e^{-z}},$$

что приводит к одинаковому температурному ходу для теплоемкостей ферми- и бозе-газов

$$C_{\sigma}^F = N^F f \left(\frac{N^F}{g^F m^F AT} \right), \quad C_{\sigma}^B = N^B f \left(\frac{N^B}{g^B m^B AT} \right), \quad (4)$$

$$f(z) \equiv \varphi(z) - z\varphi'(z).$$

При заданной температуре и $N^F = N^B$ теплоемкости одинаковы только у таких газов, для которых выполняется соотношение $g^F m^F = g^B m^B$, а теплоемкости на одну частицу равны при условии

$$\frac{N^F}{N^B} = \frac{g^F m^F}{g^B m^B}. \quad (5)$$

Для смесей теплоемкость существенно зависит от состава и плотностей газов. При условии (5) для смеси теплоемкость на одну частицу равна той же величине для отдельных газов.

3. В ультрарелятивистском случае результаты (1)–(4) сохраняют силу для одномерных газов. При этом $A = \frac{L}{\pi \hbar c}$, L — длина, c — скорость света, а масса не входит

в формулы, так что, например, условие (5) переходит в $\frac{N^F}{N^B} = \frac{g^F}{g^B}$, и ни при каких параметрах теплоемкости газов с одинаковым числом частиц не будут совпадать при данной температуре.

4. В случае парастатистики с максимальным значением чисел заполнения r теплоемкость парагаза существенно зависит от r : при низких температурах $T \ll \frac{T_0}{r} = \frac{N}{rgmA}$ расчет дает $C_{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{2r}{r+1} N \frac{T}{T_0}$, а для бозонов ($r = \infty$) $C_{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} N \frac{T}{T_0}$ при $T \ll T_0$, при высоких же температурах $T \gg T_0$

$$\frac{C_{\sigma}}{N} = \begin{cases} 1 - \frac{1}{36} \left(\frac{T_0}{T} \right)^2, & r \neq 2, \\ 1 - \frac{25}{36} \left(\frac{T_0}{T} \right)^2, & r = 2, \end{cases} \quad (6)$$

так что только предельные значения $r = 1$ и $r = \infty$, соответствующие статистикам Ферми и Бозе, имеют одинаковый температурный ход теплоемкости.

ЛИТЕРАТУРА

[1] R. M. May. Phys. Rev., 135, A1515, 1964. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, «Наука», М., 1964.

Харьковский госуниверситет

Поступило в редакцию 14 мая 1974 г.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

3-75

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

число ближайших соседей Fe—Fe уменьшается, т. е. растет степень порядка, следствием чего и является уменьшение $H_{\text{св}}$. В то же время отжиг сплавов, сильно легированных хромом, вызывает увеличение числа соседей Fe—Fe, и именно этот процесс превалирующим образом влияет на $H_{\text{св}}$. Таким образом, существеннейшим процессом изменения распределения атомов в сплавах Ni—Fe—Cr, содержащих от 8 до 13 ат. % Cr, при их отжиге в отличие от сплавов, слабо легированных хромом, является процесс появления сегрегаций атомов железа (возможно в виде ближнего расслоения).

Сопоставление изменений $H_{\text{св}}$ в этой области с данными теплоемкости показывает, что этот процесс весьма слабо влияет на зависимость теплоемкости от температуры.

Возможно, что некоторая часть атомов железа все же сохраняется в областях, богатых никелем и хромом, затрудняя процессы атомного упорядочения в этих областях.

В то же время полученные данные свидетельствуют о том, что метод ЯГР-спектров в той форме, как он здесь применялся, в ряде случаев может не быть чувствительным к перераспределению атомов в твердом растворе. Так, для сплава Ni_3Fe с 6 ат. % Cr сверхтонкое поле не меняется при отжиге, в то время как, судя по зависимости теплоемкости от температуры, структурные изменения в этом случае происходят, и, скорее всего, ведущим процессом в данном случае является процесс атомного упорядочения. Отсутствие изменения сверхтонкого поля в этом случае обусловлено, вероятно, тем, что эффект увеличения числа пар Ni—Fe (возможно, и Fe—Cr) в областях, существенно обогащенных никелем и хромом, компенсируется эффектом увеличения числа пар Fe—Fe в областях, обогащенных железом.

Таким образом, проведенное комплексное исследование процесса атомного упорядочения методами ЯГР и теплоемкости показывает, что характер процессов изменения взаимного расположения атомов в сплавах Ni—Fe—Cr различен в сплавах разного состава. Существенное легирование сплава Ni_3Fe хромом приводит к появлению областей, обогащенных железом (несмотря на уменьшение концентрации железа в целом), и за этот счет к дополнительному ослаблению атомного упорядочения типа Ni_3Fe . Из работы отчетливо видны интересные возможности комплексных исследований перераспределения атомов в твердых растворах методами ЯГР и теплоемкости.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. П. Иткин, Б. М. Могутков, Л. А. Шварцман. ФММ, 21, 732, 1966.
[2] P. Leech, K. Sykes. Phil. Mag., 27, 742, 1939. [3] A. Taylor, K. G. Hin-ton. J. Inst. Metals, 81, 169, 1952. [4] К. Г. Биннатов, Л. Г. Гавриленко, Я. П. Селицкий. «Прецизионные сплавы», Сб. № 1, М., «Металлургия», 1972.

Азербайджанский политехнический институт
им. Ч. Ильдрыма

Поступило в редакцию
3 июня 1974 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ РАЗЛОЖЕНИИ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СТЕПЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА

В работе получены асимптотические разложения волновых функций стационарных состояний для движения частицы в эффективном одномерном потенциальном поле, имеющем степенное поведение в некотором интервале координат.

Решение стационарного уравнения Шредингера для одномерного движения частицы с массой m и энергией E в степенном потенциальном поле $U(x) = -\beta x^l$, $x > 0$, $\beta > 0$, в координатном представлении при $l = 1$ можно выразить через функции Эйри (по Фоку [1]) $w(-z - \lambda) = u(-z - \lambda) + iv(-z - \lambda)$, а при $l = 2$ — через

функции параболического цилиндра $D_{-\frac{1}{2} + i\frac{\lambda}{2}} \left(z\sqrt{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} \right)$ и при всех l для

$E = 0$ — через функции Ганкеля, например, первого рода: $V z H_{l/2+1}^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right)$. Во всех случаях второе решение можно взять комплексно сопряженным первому. Обозначения: безразмерные энергия $\lambda = E \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}$ и координата

$$z = x \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}}.$$

Все эти решения для расчетов в надбарьерной области движения можно представить через функции $\frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left(i \int_x^x K dx \right)$, где для величины K квазиклассическое разложение с учетом членов четвертого порядка по постоянной Планка \hbar имеет вид

$$K(x) = \kappa(x) \left[1 + \frac{5}{64} \frac{\hbar^2 F^2}{m T^3} - \frac{1}{16} \frac{\hbar^2 F'}{m T^2} - \frac{1105}{8192} \frac{\hbar^4 F^4}{m^2 T^6} - \frac{19}{512} \frac{\hbar^4 (F')^2}{m^2 T^4} + \frac{221}{1024} \frac{\hbar^4 F^2 F'}{m^2 T^5} - \frac{7}{128} \frac{\hbar^4 F F''}{m^2 T^4} + \frac{1}{128} \frac{\hbar^4 F'''}{m^2 T^3} + O(\hbar^6) \right], \quad (1)$$

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}, \quad T = E - U(x), \quad F = -\frac{\partial U}{\partial x}, \quad F' = \frac{\partial F}{\partial x}$$

и т. д. В обычном квазиклассическом приближении $K(x) = \kappa(x)$, а члены в скобках порядка \hbar^2 соответствуют приведенным в [2].

Вдали от классических точек поворота при $\lambda \leq 0$ и для всех x при $\lambda \gg 1$ получается следующее квазиклассическое разложение модулей и фаз функций Эйри

$$w(-z - \lambda) = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{6}} \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left\{ i \left[\frac{\pi}{4} + \frac{2}{3} \lambda^{\frac{3}{2}} \Theta(\lambda) + \int_b^x \kappa dx + \int_x^\infty (\kappa - K) dx \right] \right\},$$

$$\Theta(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Для функций параболического цилиндра такое разложение имеет вид

$$D_p[(1-i)z] = \left(\frac{m\beta}{2\hbar^2 K^4} \right)^{1/8} \exp \left\{ \frac{\pi\lambda}{8} + i \left[\frac{\pi}{8} + \frac{\lambda}{4} \ln \frac{|\lambda|}{2e} + \int_b^\infty \kappa dx - \int_x^\infty K dx \right] \right\}, \quad (3)$$

$$2p = i\lambda - 1.$$

В формулах (2) и (3) b — точка поворота при $\lambda < 0$ и $b = 0$ при $\lambda > 0$. Для функций Ганкеля первого рода —

$$\begin{aligned} & \sqrt{z} H_{l+2}^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right) = \\ & = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2(l+2)}} \left(\frac{l+2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left\{ i \left[-\frac{\pi(l+4)}{4(l+2)} + \int_0^x \kappa dx + \int_x^\infty (\kappa - K) dx \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Аналогичные результаты получаются и в подбарьерной области движения при $\lambda < 0$, а также для потенциала $U(x) = \beta x^l$, $x > 0$, $\beta > 0$, вдали от точек поворота в классически доступной и недоступной областях движения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] В. А. Фок, Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн, «Сов. радио», М., 1970. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
3 июня 1974 г.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

3·75

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

в расчет входили теоретически полученные значения $a(\kappa)$. Два других значения коэффициентов вязкости η_{HA}^* и η_{MHA}^* найдены в расчетах с участием экспериментально полученных структурных факторов [8] и с использованием, соответственно к вышеуказанным коэффициентам вязкости, модельных потенциалов). При сравнении теоретически полученных значений коэффициента вязкости с экспериментальными можно сделать такой вывод: путем выбора модельного потенциала, а также подбора величины жестко-сферического диаметра D можно добиться сколь угодно хорошего согласия теории и эксперимента.

Модель жестких сфер также неплохо справляется с построением температурной зависимости кинетических коэффициентов расплавов, чем мы и воспользовались при расчете зависимости коэффициента динамической вязкости от температуры для жидкого Na. Результаты расчетов помещены в таблицу 2, где также находятся и результаты эксперимента [5]. Из сравнения указанных результатов видим, что модель жестких сфер хорошо отображает общий ход температурной зависимости η жидкого Na, хотя по величине результаты расчета несколько отличаются от результатов эксперимента. Особенно резко это отличие проявляется при использовании модельного потенциала Анималу и Хейне.

В целом можно сделать заключение, что рассматриваемая модель дает вполне приемлемые результаты в применении к расчету коэффициента вязкости расплавленных переходных металлов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] А. М. Корсунский, А. Г. Бондарева. ЖФХ, 47, № 11, 2762, 1973.
 [2] В. А. Алексеев, А. А. Андреев, В. Я. Прохоренко. УФН, 106, вып. 3, 393, 1972. [3] N. W. Ashcroft and J. Lekner. Phys. Rev., 145, 1, 83, 1966.
 [4] Д. Р. Вилсон. Структура жидких металлов и сплавов. М., «Металлургия», 1972.
 [5] Физико-химические свойства элементов. Спр. под ред. Г. В. Самсонова. Киев, «Наукова думка», 1965. [6] V. Heine, J. Abarenkov. Philos. Mag., 9, 451, 1964.
 [7] A. O. E. Animalu, V. Heine. Philos. Mag., 12, 1249, 1965. [8] L. J. Sundström. Philos. Mag., 11, 657, 1965.

Кировоградский институт
сельскохозяйственного машиностроения

Поступило в редакцию
13 июня 1974 г.,
в окончательной редакции —
11 октября 1974 г.

УДК 530.145 : 536.7

В. В. УЛЬЯНОВ, С. Е. КАЛЬНОЙ

К УЧЕТУ ВЛИЯНИЯ РАЗМЫТИЯ ГРАНИЦ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

1. В работе [1] рассматривалось влияние размытия границы металла на термодинамические свойства электронов в слое. Представляет интерес решение аналогичной задачи для провода прямоугольного сечения. С этой целью вычисляются уровни энергии в двумерной ступенчатой потенциальной яме прямоугольной формы, а затем учитывается сглаживание скачка потенциала. При этом в достаточно глубокой потенциальной яме энергия приближенно равна сумме энергий одномерных ям, соответствующих сечениям двумерной ямы. То же справедливо и в трехмерном случае. Полученные результаты использованы для расчета энергетической плотности состояний электронов провода прямоугольного сечения.

2. Рассмотрим движение частицы массы m в двумерной потенциальной яме, имеющей скачок (глубину) U_0 на границе прямоугольной формы и расположенной в области $-\frac{L_1}{2} < x < \frac{L_1}{2}$, $-\frac{L_2}{2} < y < \frac{L_2}{2}$, с отсчетом энергии от дна ямы:

$$U(x, y) = U_0 [f_1(x) + f_2(y) - f_1(x)f_2(y)], \quad (1)$$

где

$$f_1(x) = \theta\left(x - \frac{L_1}{2}\right) + \theta\left(-x - \frac{L_1}{2}\right), \quad f_2(y) = \theta\left(y - \frac{L_2}{2}\right) + \theta\left(-y - \frac{L_2}{2}\right),$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Считаем, что яма не слишком анизотропная ($L_1 \sim L_2 \sim L$) и достаточно глубокая, так что малый параметр задачи $\frac{\hbar}{L \sqrt{m U_0}} \ll 1$ (например, для глубины ямы U_0 порядка нескольких электронвольт, массы свободного электрона m и длины L , выраженной в ангстремах, численное значение малого параметра равно L^{-1}). Выбираем гамильтониан нулевого приближения \hat{H}^0 равным сумме гамильтонианов одномерных движений в потенциальных ямах, получаемых соответствующим центральным сечением двумерной ямы: $\hat{H}^0 = \hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2 + U_0 f_1(\hat{x}) + \frac{1}{2m} \hat{P}_y^2 + U_0 f_2(\hat{y})$. Тогда гамильтониан возмущения $\Delta \hat{H} = -U_0 f_1(\hat{x}) f_2(\hat{y})$. В нулевом приближении уровни энергии связанных состояний аддитивны:

$$E_{n_1 n_2}^0 = E_{n_1}^0 + E_{n_2}^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_1^2} [n_1 - \gamma(E_{n_1}^0)]^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_2^2} [n_2 - \gamma(E_{n_2}^0)]^2, \quad (2)$$

$$n_{1,2} = 1, 2, \dots, n_{1,2}^{\max},$$

где отдельные слагаемые соответствуют уровням энергии одномерных ям с „функцией размытия“ [1] γ , учитывающей отличие квантования энергии от случая непроницаемых границ ($U_0 = \infty$) и в рассматриваемой потенциальной яме равной

$$\gamma(E) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}}.$$

Волновые функции стационарных состояний в нулевом приближении мультипликативны: $\Psi_{n_1 n_2}^0 = \psi_{n_1}^0 \cdot \psi_{n_2}^0$, где ψ_n^0 — решение одномерной задачи.

Вычисление поправки к значениям энергии (2) по стандартной теории возмущений (например, [2]) дает $\Delta E = -U_0 w_1 w_2$, где вероятность пребывания частицы вне одномерной ямы $w = \frac{E}{U_0} \left[\frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} + 1 \right]^{-1}$. При этом для не очень близких к величине U_0 энергий ($U_0 - E \gg \frac{\hbar^2}{m L^2}$) единицей в скобках можно пренебречь так что поправка окончательно имеет вид

$$\Delta E_{n_1 n_2} = - \frac{2 \hbar^2}{m L_1 L_2} \cdot \frac{E_{n_1}^0 \cdot E_{n_2}^0}{U_0 \sqrt{(U_0 - E_{n_1}^0)(U_0 - E_{n_2}^0)}}. \quad (3)$$

К этому выражению для поправки приводит и вариационный метод.

Во всех случаях, кроме не представляющих интереса очень близких к величине U_0 энергий, отношение поправки к результату нулевого приближения (2) мало: при $n_1 \sim n_2 \sim 1$ и $n_1 \sim 1$, $E_{n_2}^0 \sim U_0$ (или $n_2 \sim 1$, $E_{n_1}^0 \sim U_0$) оно порядка $\left(\frac{\hbar^2}{L^2 m U_0} \right)^2$, а при

$E_{n_1}^0 \sim E_{n_2}^0 \sim U_0$ — порядка $\frac{\hbar^2}{L^2 m U_0}$. Учет же γ в формуле (2) дает поправку к главному значению, соответствующему непроницаемой границе, порядка $\frac{\hbar}{L \sqrt{m U_0}}$, что

существенно в расчетах поверхностных и осцилляционных членов термодинамических величин, а поправкой (3) можно пренебречь.

3. В случае не очень сильного размытия скачка потенциала (область размытия по координатам $\delta \lesssim \frac{\hbar}{\sqrt{m U_0}}$) оценка аналогичной (3) поправки показывает, что свойство

аддитивности энергетического спектра (2) сохраняет силу с той же точностью, что и для скачка. При этом «функцию размытия» γ можно рассчитать для конкретной модели сглаженного потенциала (простые примеры приведены в [1]).

4. Отметим также, что в трехмерном случае для достаточно глубокой потенциальной ямы со скачком на границе прямоугольной формы в нулевом приближении справедливо аналогичное (2) свойство аддитивности уровней энергии с малой поправкой, подобной (3) для двумерного случая. То же касается не очень сильного размытия скачка потенциала.

5. На основании полученных уровней энергии двумерной сглаженной потенциальной ямы (2) вычисляется функция $\nu(E)$ энергетической плотности состояний электронов с квадратичным законом дисперсии в модели провода прямоугольного сечения с размытыми границами. Расчет дает:

$$\begin{aligned} \gamma(E) = \gamma_0(E) & \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} \right) [1 - 2\gamma(E)] + \right. \\ & + \frac{1}{2\pi} \sum_{l_1, l_2 = -\infty}^{\infty} \frac{\sin \left[2\pi \sqrt{l_1^2 L_1^2 + l_2^2 L_2^2} \sqrt{\left(\frac{N_1}{L_1} \right)^2 + \left(\frac{N_2}{L_2} \right)^2} \right]}{\sqrt{l_1^2 L_1^2 + l_2^2 L_2^2} \sqrt{\left(\frac{N_1}{L_1} \right)^2 + \left(\frac{N_2}{L_2} \right)^2}} + 0 \left[\left(\frac{\hbar}{L \sqrt{mE}} \right)^{3/2} \right] \Bigg\}, \\ N_\kappa & \equiv n_\kappa \left(\frac{E l_\kappa^2 L_\kappa^3}{l_1^2 L_1^2 + l_2^2 L_2^2} \right), \quad \kappa = 1, 2, \end{aligned} \quad (4)$$

где штрих у суммы означает отсутствие слагаемого с $l_1 = 0$ и $l_2 = 0$, $\gamma_0(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$ — плотность состояний на единицу объема в неограниченном случае, а $n_\kappa(E) = \frac{L_\kappa}{\pi \hbar} \sqrt{2mE} + \gamma(E)$. Отброшенные члены в скобках соответствуют

поверхностным осцилляциям (порядка $L^{-3/2}$) и плавным величинам (порядка L^{-2}). В предельном случае $L_1 \rightarrow \infty$, отвечающем слою толщиной L_2 , формула (4) переходит в формулу (2) работы [1]. При исследовании свойств вырожденного электронного газа необходимо знать $\gamma(E)$ для энергий, не превосходящих фермиевскую граничную энергию, которая порядка величины U_0 , но не очень близка к ней, так что справедливо аддитивное свойство уровней энергии (2), а поправка, например (3) для модели со скачком потенциала, дает вклад в отбрасываемые члены в скобках порядка L^{-2} . Плавная поверхностная часть плотности состояний и определяемые поперечными размерами L_1 и L_2 осциллирующие члены в выражении (4) аналогичны полученным в работе [1] для слоя, так что влияние размытия границ на термодинамические величины в рассматриваемом приближении подобно случаю слоя.

ЛИТЕРАТУРА

[1] В. В. Ульянов, Нгуен Дык Тьен. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 135, 1974. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
27 июля 1974 г.,
в окончательной редакции —
27 сентября 1974 г.

УДК 535.376.2 + 535.374

А. М. НЕМЧЕНКО

ВЛИЯНИЕ ИНФРАКРАСНОГО СВЕТА НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦИРУЮЩИХ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{ZnS} \cdot \text{Cu}$

Повышенная концентрация активатора в электролюминесцирующем сульфиде цинка и неоднородность структуры его кристаллической решетки приводит к созданию условий для появления большого числа оптически активных центров и неравномерному их распределению. Неравномерность распределения центров люминесценции часто проявляется в спектрах при возбуждении свечения $\text{ZnS} \cdot \text{Cu}$ различными способами [1]. Однако не всегда по виду спектральных кривых излучения можно судить о характере распределения центров люминесценции в объеме кристаллов. Особенности распределения центров свечения в $\text{ZnS} \cdot \text{Cu}$ -электролюминофорах должны хорошо проявляться при воздействии на возбужденный образец инфракрасного (ИК) света, поскольку суммарный эффект действия его на электролюминесценцию (увеличение яркости свечения или ослабление ее) зависит от относительной роли объемных зарядов в областях локального усиления электрического поля и в объеме [2].

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

10·75

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

В. В. УЛЬЯНОВ, И. Б. СНАПИРО

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ПАРАГАЗА

1. В связи с интересом, проявляемым последнее время в квантовой физике [1—4], к промежуточным статистикам (парастатистикам) и подчиняющимся им газам (квази) частиц, в настоящей работе рассматриваются общие и низкотемпературные термодинамические свойства идеального парагаза с максимальным значением r чисел заполнения одночастичных состояний при произвольной зависимости плотности состояний от энергии. Такому парагазу присущи многие черты ферми- и бозе-газа, являющихся его предельными случаями ($r=1$ для ферми-газа и $r=\infty$ для бозе-газа).

2. Отметим, прежде всего, некоторые общие свойства парагаза при произвольном r . Средние значения чисел заполнения одночастичных состояний κ

$$\langle n_{\kappa} \rangle = n^p(\epsilon_{\kappa}) = \frac{1}{\exp \frac{\epsilon_{\kappa} - \zeta}{T} - 1} - \frac{r+1}{\exp \frac{(\epsilon_{\kappa} - \zeta)(r+1)}{T} - 1} \quad (1)$$

получаются [1, 2] обычными методами [5] квантовой статистики, например на основе большого канонического распределения, а термодинамику парагаза можно построить с помощью потенциала

$$\Omega^p = - \int_0^{\infty} \Gamma(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon, \quad (2)$$

совместно с условием $N = \int_0^{\infty} \nu(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon$, дающим зависимость химического потенциала ζ от числа частиц N , температуры T и внешних параметров λ . Нижний предел интегралов отвечает $\epsilon_{\kappa}^{\min} > 0$, $\Gamma(\epsilon)$ — число состояний с энергией, меньшей ϵ , а плотность состояний $\nu(\epsilon) = \frac{d\Gamma}{d\epsilon}$. При степенной зависимости числа состояний от энергии $\Gamma(\epsilon) =$

$= A\epsilon^{\alpha}$ (например, $\alpha = m/l$ для свободного m -мерного газа с изотропным l -степенным законом дисперсии) для любой статистики средняя энергия пропорциональна Ω -потенциалу: $E = -\alpha\Omega$. В частности, в трехмерном однородном парагазе $E = \alpha PV$, что удобно для получения уравнения состояния (P — давление, V — объем). Для парагазов интересно следующее обстоятельство. Вся температурная шкала естественным образом разбивается на три области двумя «опорными» точками — граничной энергией ϵ_p (при $r=1$ это есть энергия Ферми ϵ_F), равной ζ при $T=0$, и температурой T_0 обращения в нуль химпотенциала. При этом, вообще говоря, T_0 слабо зависит от r , а $\epsilon_p \rightarrow 0$ с ростом r (любопытно, что $T_0 = 0,99 \epsilon_F$ для обычного ферми-газа с $\alpha = 3/2$).

3. В области низких температур $T \ll \epsilon_p$ (при $r \rightarrow \infty$ эта область захлопывается) парагазы по своим свойствам близки к ферми-газу. Для интегралов типа (2) можно получить асимптотическое разложение, являющееся обобщением зоммерфельдовской формулы в ферми-статистике [5, 6]: для плавной функции $\varphi(\epsilon)$

$$\int_0^{\infty} \varphi(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon = r \int_0^{\zeta} \varphi(\epsilon) d\epsilon + \frac{r\pi^2 T^2}{3(r+1)} \varphi'(\zeta) + O(T^4; e^{-\frac{\zeta}{T}}). \quad (3)$$

В соответствии с этим разложением термодинамика парагаза определяется свободной энергией

$$F = N\epsilon_p - r \int_0^{\epsilon_p} \Gamma(\epsilon) d\epsilon - \frac{r\pi^2 T^2}{3(r+1)} \nu(\epsilon_p), \quad (4)$$

где ϵ_p удовлетворяет уравнению $N = r\Gamma(\epsilon_p)$. В частности, теплоемкость при постоянных внешних параметрах $C_{\lambda}^p = \frac{2r\pi^2}{3(r+1)} T \nu(\epsilon_p)$ линейна по T . При $r=1$ эти результаты переходят в известные в теории ферми-газа [7]. С ростом r эффективное отталкивание ослабевает (например, растут флуктуации плотности числа частиц). В случае $\Gamma = A\epsilon^{\alpha}$ граничную энергию и теплоемкость парагаза можно сравнить с соответствующими величинами для ферми-газа в тех же условиях:

$$\epsilon_p = \frac{\epsilon_F}{r^{1/\alpha}}, \quad C_\lambda^p = \frac{2r^{1/\alpha}}{r+1} C_\lambda^F. \quad (5)$$

Так, для свободного трехмерного парагаза с квадратичным законом дисперсии ($\alpha = \frac{3}{2}$) при $r = 2, 3, 4$ $C^p > C^F$, а при $r \geq 5$ $C^p < C^F$.

4. Заметим также, что при $\alpha = 1$ (например, в двумерном случае при квадратичном законе дисперсии) теплоемкости ферми- и бозе-газов имеют одинаковый температурный ход для всех температур, что, однако, верно лишь для этих предельных парастатистик [8]. В области высоких температур $T \gg T_0$ парагазы уже при $r > 1$ подобны бозе-газу, что проявляется в квантовых обменных поправках, соответствующих эффективно-му притяжению, на фоне общей для всех парагазов близости к классическому бoльцмановскому газу. В промежуточной же области $T \sim T_0$ возникают разнообразные особенности поведения парагазов в зависимости от r и α .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] А. Исихара. Статистическая физика, М., «Мир», 1973. [2] S. I. Ben-Avraham. Amer. J. Phys., 38, 1335, 1970. [3] А. Б. Говорков. Препринт ОИЯИ Р2-6128, Дубна, 1971. [4] R. Y. Cusson. App. Phys., 55, 22, 1969. [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, М., «Наука», 1964. [6] R. Weinstock. Amer. J. Phys., 37, 1273, 1969. [7] И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов. Электронная теория металлов, М., «Наука», 1971. [8] В. В. Ульянов, С. С. Соколов. Изв. вузов СССР, Физика, № 1, 153, 1975.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
20 июня 1975 г.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

7·76

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

где A и B — постоянные, $\alpha = \gamma H_1 t_u$, $\alpha' = \gamma H_1 t'_u$. Из (4) видно, что кроме обычного сигнала эха в момент $t = 2\tau$ возникает дополнительный сигнал при $t = 3\tau$.

Аналогичный расчет был проделан для случая, когда на образец (монокристалл) наложено постоянное магнитное поле, направленное по образующей конуса нулевого расщепления ($I = 1$, $\eta = 0$). Система уровней энергии в этом случае [2] будет: $\lambda_1 = 0$,

$$\lambda_{2,3} = \pm \frac{\sqrt{1+3R^2}}{4R} eQq_{zz},$$

где $R = -\frac{eQq_{zz}}{4\gamma \hbar H_0}$. Ось радиочастотной катушки считалась ориентированной параллельно оси Z . Среднее значение намагниченности $\langle M_z \rangle$ в этом случае было получено в виде:

$$\langle M_z \rangle = A_1 \sin \alpha (1 - \cos \alpha') [A_2 \cos \alpha (1 + \cos \alpha') + A_3 (2 \cos \alpha' + 1)] \sin \omega_0 (t - 2\tau) + B_1 (1 - \cos \alpha)^2 (1 - \cos \alpha') \sin \alpha' \sin \omega_0 (t - 3\tau), \quad (5)$$

где A_1 , A_2 , A_3 , и B_1 — функции от R , $\omega_0 = \frac{\sqrt{1+3R^2}}{4\hbar R} eQq_{zz}$,

$$\alpha = \frac{\sqrt{1-R^4}}{3R^2+1} \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma H_1 t_u, \quad \alpha' = \frac{\sqrt{1-R^4}}{3R^2+1} \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma H_1 t'_u.$$

Таким образом, для $I = 1$ одночастотное возбуждение, которое вызывает переходы между тремя эквидистантными уровнями энергии, позволяет получить дополнительный сигнал квадрупольного спинового эха в момент времени $t = 3\tau$. Возникновение такого дополнительного сигнала в момент времени $t = 3\tau$ при экспериментах в постоянном магнитном поле может свидетельствовать о выполнении условия конуса нулевого расщепления в ЯКР, т. е. этот факт может быть использован для экспериментальной идентификации конуса нулевого расщепления для $I = 1$.

Таким образом, возникает возможность применения импульсного метода ЯКР в структурных исследованиях, тогда как до настоящего времени для этих целей использовался лишь стационарный метод, чувствительность которого недостаточна при наличии неоднородного уширения линии поглощения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. С. Гречишкин. Ядерные квадрупольные взаимодействия в твердых телах, М., «Наука», 263, 1973. [2] Н. Я. Синявский, В. С. Гречишкин. Изв. вузов СССР, Физика, № 1, 136, 1976. [3] В. С. Гречишкин. ФТТ, 15, 4, 1157, 1973. [4] T. P. Das, A. K. Saha. Phys. Rev., 98, 516, 1955.

Калининградский госуниверситет

Поступило в редакцию
10 февраля 1976 г.

УДК 539.216.2 : 538

С. Е. КАЛЬНОЙ, В. В. УЛЬЯНОВ

О ВЛИЯНИИ РАЗМЫТИЯ ГРАНИЦЫ МЕТАЛЛА НА МАГНИТОПЛЕННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

1. Наличие особых осцилляций термодинамических величин тонкой металлической пластинки в перпендикулярном магнитном поле с циклотронным радиусом, большим толщины пластинки так называемых магнитопленочных осцилляций (МПО), было предсказано в [1] (см. также [2]). В работе [3] было проведено подробное исследование МПО в приближении квадратичного закона дисперсии электронов и в модели непроницаемых границ металла. Эти осцилляции оказались характерны тем, что при определенных значениях магнитного поля происходит резонансное возрастание их амплитуды. Представляет интерес выяснить, сохраняется ли это возрастание при учете размытия границ металла. В настоящей работе показано, что учет размытия границы приводит лишь к ослаблению резонансной амплитуды МПО.

2. В перпендикулярном пластинке магнитном поле для квадратичного закона дисперсии уровни энергии электронов имеют вид суммы магнитных уровней энергии Лан-

дау ϵ_L и энергии размерного квантования ϵ_\perp для перпендикулярного пластинке движения. Используя результаты работы [4], можем представить эти уровни энергии (без учета парамагнетизма) в виде

$$\epsilon_{n,n_1} = \epsilon_L + \epsilon_\perp = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \epsilon_i [n_1 - \gamma(\epsilon_\perp)]^2, \quad (1)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots,$$

где циклотронная частота $\omega = \frac{|e| \hbar}{mc}$, m — масса, характерная энергия размерного кван-

тования $\epsilon_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$, L — толщина пластинки, $\gamma(\epsilon)$ — «функция размытия» (см. [4, 5], а также [6]), являющаяся функционалом от формы пленочного потенциала. Явный вид γ для простейших моделей приведен в [4].

3. Используя выражение (1), стандартными методами квантовой статистики (например, [3]) с помощью Ω -потенциала вычисляем дифференциальную магнитную восприимчивость $\chi = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial H^2}$, осциллирующая с изменением магнитного поля часть которой равна

$$\chi_{\text{осц}} = -\lambda S \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \Psi(\tau l) \left\{ \cos \eta l - \left(\frac{2\alpha}{l} \right)^{1/2} \sum_{\kappa=-\kappa_l}^{\kappa_l} \left(1 - \frac{\kappa^2}{l^2 \beta^2} \right)^2 \times \right. \\ \left. \times \cos \left[\eta l + 2\pi \alpha \frac{\kappa^2}{l} + 2\pi |\kappa| \gamma \left(\frac{\kappa^2}{l^2} \alpha \hbar \omega \right) - \frac{\pi}{4} \right] \right\}, \quad (2)$$

где $\lambda = \frac{e^2}{c^2} \frac{\eta^2}{4\pi^3 m}$, S — площадь пластинки, $\tau = 2\pi^2 \frac{T}{\hbar \omega}$, T — температура, $\Psi(x) = \frac{x}{\text{sh } x}$, $\eta = 2\pi \frac{\zeta}{\hbar \omega}$, ζ — химический потенциал, $\alpha = \frac{\hbar \omega}{4\epsilon_1}$, причем $\sqrt{\alpha} \gg 1$, κ_l — целая часть βl , $\beta = \frac{\omega_L}{\omega}$, где ω_L — классическая частота перпендикулярного пластинке движения.

Первое слагаемое в скобках соответствует поверхностным осцилляциям и имеет тот же вид, что и в непроницаемом случае. Второй член представляет собой осцилляции, обусловленные наложением размерного и магнитного квантования. При $\kappa = 0$ это есть объемные осцилляции де Гааза—ван Альфена, а при $\kappa \neq 0$ — магнитопленочные осцилляции. В случае непроницаемых границ, когда $\gamma \equiv 0$, формула (2) соответствует результатам работы [3].

4. При не очень низких температурах $\tau \gg 1$, когда существенно слагаемое с $l=1$, МПО появляются в слабых магнитных полях с $\beta \gg 1$. При этом в непроницаемом случае амплитуда МПО может значительно возрасти при определенных значениях магнитного поля. Действительно, из формулы (2) при $\gamma \equiv 0$ видно, что в полях с целым α интерференция МПО дает резонансный всплеск относительной амплитуды порядка β . Учет размытия границы приводит к появлению у МПО дополнительного разброса фазы, пропорционального γ . Однако из (2) видно, что это обстоятельство не устраняет резонанс полностью, а лишь ослабляет его. В наиболее интересном случае, когда $\beta \gg 1$, оценка суммы по κ показывает, что резонансный всплеск амплитуды МПО имеет порядок $\beta^{1/2}$, т. е. учет размытия границы пластинки приводит к уменьшению резонансной амплитуды магнитной восприимчивости в $\beta^{1/2}$ раз.

Таким образом, размытие границы металлической пластинки сохраняет эффект резонансного возрастания амплитуды МПО магнитной восприимчивости, однако величина резонансного всплеска при этом уменьшается.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Г. А. Гогодзе, И. О. Кулик. ФТТ, 11, 2182, 1969. [2] Л. Э. Гуревич, А. Я. Шик. ЖЭТФ, 54, 1873, 1968. [3] С. С. Недорезов. ЖЭТФ, 57, 907, 1969. [4] В. В. Ульянов, Нгуен Дык Тьен. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 135, 1974. [5] В. В. Ульянов, С. Е. Кальной. Изв. вузов СССР, Физика, № 3, 147, 1975. [6] V. E. Kenner, R. E. Allen. Phys. Rev. B, 11, 2858, 1975.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
2 февраля 1976 г.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

9·76

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

Потенциал парных взаимодействий взят в борн-майеровской форме [4], а трехчастичный — в симметричной экспоненциальной [9, 10], с неизвестными параметрами обменного отталкивания ρ и b и трехчастичного взаимодействия — A . Последние определяются методом Борна и Майера [11] по высокотемпературным экспериментальным данным для параметра решетки, коэффициента теплового расширения, сжимаемости и ее производных по температуре и давлению и энергии связи. Причем в соответствии с экспериментальной точностью допускалось варьирование последней величины в пределах 2–3%.

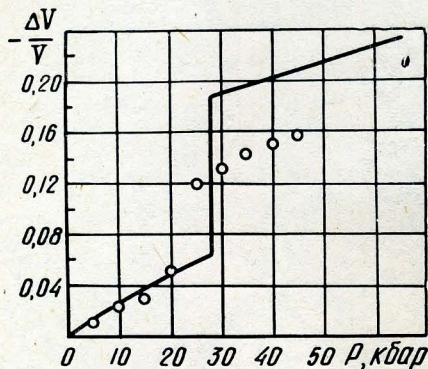


Рис. 1. Относительное изотермическое сжатие фтористого серебра при 25°С. Экспериментальные значения \circ взяты из [13]

Параметры потенциалов вместе с рассчитанными характеристиками полиморфного превращения $B1 \rightleftharpoons B2$ при комнатной температуре во фтористом серебре приведены в таблице. Экспериментальные значения взяты из [12]. На рис. 1 графически представлен результат расчета зависимости относительного изотермического сжатия от давления при температуре 25°С с учетом происходящего полиморфного превращения.

Принимая во внимание наличие в обоих случаях сравнения всего по одной экспериментальной работе и возможность в этой связи значительных ошибок, согласие теории с экспериментом можно признать вполне удовлетворительным.

Заметим также, что экспериментальное определение сжатия фтористого серебра в [13] производилось лишь на одном образце чистотой всего 98%. С другой стороны, и фтористое серебро, по-видимому, в меньшей

степени, чем ранее исследованные галоиды щелочных металлов и аммония [9, 10], удовлетворяют борн-майеровской модели идеального ионного кристалла.

Автор выражает признательность И. П. Базарову за обсуждение работы и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] A. May. Phys. Rev., 52, 339, 1937; 54, 629, 1938. [2] R. B. Jacobs. Phys. Rev., 54, 468, 1938. [3] P. O. Löwdin. Adv. Phys., 5, 1, 1956. [4] М. Борн, К. Хуан. Динамическая теория кристаллических решеток, М., ИЛ, 1958. [5] J. E. Mayer. J. Chem. Phys., 1, 327, 1933. [6] K. J. Rao, C. N. R. Rao. Proc. Phys. Soc., 91, 754, 1967. [7] C. N. R. Rao, K. J. Rao. Sol. Stat. Chem., 4, 131, 1967. [8] И. П. Базаров. Статистическая теория кристаллического состояния. Изд. МГУ, 1972. [9] И. П. Базаров, В. В. Котенок. ЖФХ, 47, 2239, 1973. [10] И. П. Базаров, Э. В. Геворкян. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 101, 1974. [11] J. E. Mayer. Zs. f. Phys., 75, 1, 1932. [12] P. M. Halleck, J. C. Jamieson, C. W. F. T. Pistorius. J. Phys. Chem. Sol., 33, 769, 1972. [13] S. N. Vaidya, G. C. Kennedy. J. Phys. Chem. Sol., 32, 951, 1971.

Московский госуниверситет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в редакцию
19 февраля 1976 г.

УДК 536.7

В. В. УЛЬЯНОВ, М. И. ВАСИЛЕВА

О ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ В БОЗЕ-ГАЗЕ ПРИ АНИЗОТРОПНЫХ ЗАКОНАХ ДИСПЕРСИИ

1. Изучение экситонных возбуждений в кристаллах привело к установлению любопытной особенности их энергетического спектра — разного рода объемных и поверхностных анизотропных законов дисперсии [1]. Например, при малых значениях импульса $\epsilon(\mathbf{p}) = \beta_1 p_1^2 + \beta_2 \sqrt{p_2^2 + p_3^2}$, что вызывает появление в объемном газе таких возбуждений фазового перехода второго рода со скачком теплоемкости. В связи с этим представляет интерес рассмотреть поведение бозе-газа разной размерности с различного вида анизо-

тропными (и изотропными) законами дисперсии, обладающими хотя бы при малой энергии степенной зависимостью плотности состояний от энергии:

$$\nu(\varepsilon) = B\varepsilon^{\alpha-1}. \quad (1)$$

2. К такой зависимости приводит m -мерный анизотропный закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p}) = \sum_{\kappa=1}^m \beta_{\kappa} p_{\kappa}^{\delta_{\kappa}}$ с $\alpha = \sum_{\kappa=1}^m \delta_{\kappa}^{-1}$ и $B^{-1} \sim \prod_{\kappa=1}^m \beta_{\kappa}^{\delta_{\kappa}-1}$. Упомянутый закон дисперсии эк-

ситонов дает $\alpha = 5/2$ и $B^{-1} \sim \beta_1^{1/2} \beta_2^2$. Сюда же относятся и все изотропные m -мерные l -степенные законы $\varepsilon(\mathbf{p}) = \beta p^l$ с $\alpha = m/l$. В других случаях, например для релятивистского закона дисперсии, такая степенная плотность состояний возникает, в частности, при малых энергиях (в нерелятивистском пределе), что существенно для качественного анализа фазовых переходов в бозе-газе.

3. Рассмотрим термодинамические свойства идеального бозе-газа со степенной плотностью состояний (1). Характер фазовых переходов в таком газе можно установить аналогично [2] на основе исследования при $\xi \ll 1$ интегралов [3] типа

$$\int_0^{\infty} \frac{z^{\alpha-1} dz}{e^{z+\xi} - 1}, \quad \text{определяющих, согласно обычным методам квантовой статистики [4],}$$

термодинамические величины бозе-газа вблизи точки возможного фазового перехода. Результаты сводятся к следующему. В случае $\alpha > 1$ при $T < T_0$ имеется конденсат с относительным числом частиц

$$N_0/N = 1 - (T/T_0)^{\alpha}, \quad (2)$$

где температура бозе-эйнштейновской конденсации T_0 находится из соотношения $N = B\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)T_0^{\alpha}$ (Γ — гамма-функция, ζ — дзета-функция Римана). В области значений $1 < \alpha < 3/2$ теплоемкость и ее первая производная по T не имеют скачков при T_0 (вообще говоря, при $\frac{1}{n-1} < \alpha - 1 \leq \frac{1}{n-2}$ существуют менее интересные фазовые переходы n -го рода с $n > 3$). В случае $\alpha = \frac{3}{2}$ (например, в обычном трехмерном бозе-газе при квадратичном изотропном законе дисперсии [4]) возникает фазовый переход 3-го рода с изломом теплоемкости и скачком ее производной

$$\Delta C'(T_0) = -3,66 \frac{N}{T_0}. \quad (3)$$

В области значений $3/2 < \alpha \leq 2$ фазовый переход третьего рода характеризуется бесконечным скачком производной теплоемкости (она степенным образом растет при $T \rightarrow +T_0$ для $\alpha \neq 2$ и логарифмически для $\alpha = 2$). При этом для всех $1 < \alpha \leq 2$

$$C(T_0) = N\alpha \frac{(\alpha+1)\zeta(\alpha+1)}{\zeta(\alpha)}. \quad (4)$$

В случае же $\alpha > 2$ появляется скачок самой теплоемкости

$$\Delta C(T_0) = -N \frac{\alpha^2 \zeta(\alpha)}{\zeta(\alpha-1)}, \quad (5)$$

сопровождаемый для $2 < \alpha \leq 3$ растущей при $T \rightarrow +T_0$ производной, а для $\alpha > 3$ — конечной. Итак, при $0 < \alpha \leq 1$ особенностей нет, а при $\frac{1}{n-1} < \alpha - 1 \leq \frac{1}{n-2}$ ($n = 2, 3, \dots$) возникает конденсация с фазовым переходом n -го рода.

4. Еще раз следует подчеркнуть, что качественные особенности фазового перехода зависят от поведения плотности состояний при $\varepsilon \rightarrow 0$, в частности от показателя степени α в (1), а количественные характеристики определяются плотностью состояний в интервале энергий $0 < \varepsilon \lesssim T$.

Отметим также, что в случае релятивистского закона дисперсии при любых отличных от нуля значениях массы покоя и плотности трехмерного газа появляется фазовый переход третьего рода, соответствующий нерелятивистскому пределу и локально степенному ходу плотности состояний (1) с $\alpha = 3/2$, а термодинамические величины в точке перехода существенно зависят от массы покоя и плотности газа, так что, например, «ультрарелятивистский» случай в работе [5] отвечает линейному закону дисперсии для всех энергий, а не предельному случаю релятивистского закона.

Для анизотропных законов дисперсии типа $\epsilon = \sum_{k=1}^m \beta_k \rho_k \delta_k$ удобно графически представить область обратных показателей степени δ_k^{-1} , для которых реализуются различные случаи фазовых переходов: согласно полученным выводам в системе координат $\delta_1^{-1}, \delta_2^{-1}, \dots$ эти области отвечают слоям между плоскостями, пересекающими оси координат в точках 1, 3/2, 2 и т. д.

Случаю упомянутого вначале закона дисперсии экситонов с $\alpha = 5/2$ соответствует исследованный в работе [1] фазовый переход второго рода.

Если сравнить метод произвольной плотности состояний в теории ферми- и бозе-газов, то для вырожденного ферми-газа основные свойства не зависят, вообще говоря, от конкретного вида плотности состояний, и термодинамика строится [6] при произвольном $v(\epsilon)$ (то же для всех парагазов [7] при низких температурах). Так, теплоемкость линейна по T и пропорциональна плотности состояний на поверхности Ферми. Конкретный вид $v(\epsilon)$ существен для промежуточных и высоких температур. Общие же черты поведения бозе-газов весьма чувствительны к виду $v(\epsilon)$ при малых энергиях.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] С. А. Москаленко. Бозе-эйнштейновская конденсация экситонов и би-экситонов, изд. АН МССР, Кишинев, 1970. [2] М. Ш. Рыбкин. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 110, 1971. [3] J. E. Robinson. Phys. Rev., 83, 678, 1951. [4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, М., «Наука», 1964. [5] R. M. Maue. Phys. Rev., 135, A1515, 1964. [6] И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов. Электронная теория металлов, М., «Наука», 1971. [7] В. В. Ульянов, И. Б. Снапиро. Изв. вузов СССР, Физика, № 10, 152, 1973.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
12 января 1976 г.

УДК 620.178.311.6:752.2

В. А. ХОХЛОВ, В. Н. КАЩЕЕВ, В. И. МАКСАК

КОНТАКТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ В УСЛОВИЯХ СЖАТИЯ

Особенностью процесса деформации металлических тел, приведенных в соприкосновение, является адгезионное взаимодействие — один из основных факторов, определяющих диссипативные свойства контакта [1]. Признаками адгезии в этом случае является образование петли гистерезиса в координатах «деформация — перемещение» при циклическом сжатии и наличие остаточного сцепления, оцениваемого отрицательной нормальной к плоскости контакта нагрузкой, необходимой для разделения поверхностей.

Непосредственное исследование адгезии металлов затрудняется из-за микронеровностей на поверхностях тел, соизмеримых по размерам с величиной деформации сближения, из-за дискретности контакта, а также тем, что места сцепления разрушаются освобожденной упругой энергией материала при снятии нагрузки. Для получения особенностей контактного взаимодействия поверхностей были использованы образцы в виде контактирующих полусфер, моделирующих контурные площадки реального контакта, и изготовленные из каучука и 15%-ного водного раствора желатина.

Выбор этих материалов объясняется их низким модулем упругости и возможностью получения оптически гладких поверхностей, что значительно повышает точность и воспроизводимость опытов.

Исследования проводились на установке, схема которой показана на рис. 1. Сфера 1 устанавливалась на подвижной рамке 3, подвешенной на гибких нитях. Сжатие сферы 1 с неподвижной сферой 2 осуществлялось через рамку 3, нить, рычаг 4, качающийся на упругом шарнире. Отрывающее усилие (отрицательная нагрузка) прикладывалось разновесами через рычаг 6. Измерение диаметра пятна контакта и перемещений точек сфер проводилось с помощью оптической системы микроскопа БМИ-1 с точностью до 0,0025 мм.

При сближении сфер почти до соприкосновения за счет молекулярных сил они взаимно притягиваются, образуя пятно контакта диаметром a_0 (рис. 2, а). Приложение сжимающей внешней силы вызывает деформацию сфер, графически выражающуюся линией 1 (рис. 2, а) [6].

Снятие нагрузки в первый момент не вызывает существенного изменения контактного диаметра, так как за счет сил сцепления по периферии контактной зоны сферы удерживаются от разъединения. Уменьшение a начинается тогда, когда упругие восстанавливающие силы превысят силы сцепления и в этом случае произойдет разрыв адгези-

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

11·76

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

довской сферы будет иметь место для всех времен и расстояний, удовлетворяющих неравенству

$$R^2 < c^2 T^2.$$

Расчет спектрально-углового распределения энергии излучения заряда при гиперболическом движении за конечный промежуток времени может быть выполнен несложным образом (см. [6]). Интенсивность излучения при этом получается равной

$$U = \frac{e^2 c}{6r_0(z_0 - r_0)}.$$

ЛИТЕРАТУРА

- [1] J. Cohen and R. Wald. J. Math. Phys., **12**, 1845, 1971. [2] R. S. Hanni and R. Ruffini. Phys. Rev., **D8**, 3259, 1973. [3] D. M. Chitre, C. V. Vishveshwara. Phys. Rev., **D12**, 1538, 1975. [4] J. A. Petterson. Phys. Rev., **D12**, 2218, 1975. [5] Ц. И. Гуцунаев, Ю. Г. Ермолаев, Я. П. Терлецкий. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 1976. [6] Ц. И. Гуцунаев. Письма в ЖТФ, **1**, 192, 1975.

Университет дружбы народов
им. Патриса Лумумбы

Поступило в редакцию
24 мая 1976 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, А. И. ХАЛЯВИН

О НЕФУНКЦИОНАЛЬНОМ ПОДХОДЕ В ВКБ-МЕТОДЕ

1. Традиционный подход в ВКБ-методе квантовой механики при получении одномерных квазиклассических правил квантования связан с решением уравнения Шредингера для стационарных состояний в координатном представлении: сшиваются асимптотики волновых функций по разные стороны от классических точек поворота (получение формул «связи») с помощью функций Эйри в окрестности этих точек [1] или обходом точек поворота в комплексной плоскости координат [2—4]. Существует, однако, возможность решения задачи об определении уровней энергии вне рамок подобного функционального метода [5], что особенно удобно для нахождения поправок к правилам квантования Бора — Зоммерфельда.

2. Исходным соотношением в нефункциональном подходе может служить запись числа состояний с искомым значением энергии E_n через квантовое число n . В силу отсутствия вырождения

$$\int_{-i\infty+\delta}^{i\infty+\delta} \frac{d\beta e^{\beta E_n} \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}}}{2\pi i \beta} = \text{Sp} \theta(E_n - \hat{H}) = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

$$\delta \rightarrow +0,$$

где ступенчатая функция Хэвисайда $\theta(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha > 0, \\ 0, & \alpha < 0, \end{cases}$ доопределяется значением $\frac{1}{2}$

в нуле самым обратным преобразованием Лапласа, а \hat{H} — гамильтониан системы. В справедливости обоих равенств в (1) можно убедиться вычислением шпуров в энергетическом представлении. Причем первое отвечает известной связи между

статсуммой $Z(\beta) = \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}}$ и числом состояний $\Gamma(E) = \text{Sp} \theta(E - \hat{H})$ с энергией, меньшей E , а второе следует из указанного доопределения θ -функции:

$$\text{Sp} \theta(E_n - \hat{H}) = \sum_{k=0}^{\infty} \theta(E_n - E_k) = \sum_{k=0}^{n-1} 1 + \theta(0) = n + \frac{1}{2}.$$

Таким образом, задача сводится к получению квазиклассического разложения для $\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}}$ при $\text{Re} \beta > 0$ и аналогична соответствующей аппроксимации для статсуммы в квантовой статистике [6, 7]. При этом можно использовать различные приемы вы-

числения такого шпура. Например, для получения только первой квазиклассической поправки в случае

$$\hat{H} = \hat{T}(p) + \hat{U}(x) \quad (2)$$

удобна следующая операторная симметризация:

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{(-\beta/2)\hat{U}} e^{-\beta \hat{T}} e^{(-\beta/2)\hat{U}} \left[1 + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24} (\hat{U}')^2 \hat{T}'' - \frac{\hbar^2 \beta^3}{12} \hat{U}'' (\hat{T}')^2 + O(\hbar^3) \right], \quad (3)$$

где штрихи означают производные по соответствующим аргументам. Отсюда на основании инвариантности шпура, используя плоские волны

$$\langle x | p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right),$$

имеем:

$$\begin{aligned} \text{Sp } e^{-\beta \hat{H}} &= \int dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \\ &= \int \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \left[1 - \frac{\hbar^2 \beta^3}{24} (T')^2 U'' + O(\hbar^4) \right] e^{-\beta H(p, x)}, \end{aligned}$$

$H(p, x)$ — соответствующая классическая функция Гамильтона системы. Подстановка этого выражения в левую часть формулы (1) дает

$$\int \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \left[1 - \frac{\hbar^2}{24} (T')^2 U'' \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \Theta [E_n - H(p, x)] + O(\hbar^3),$$

а правила квантования преобразуются к окончательному виду

$$\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4)$$

где интегралы берутся между классическими точками поворота. Для квадратичного закона дисперсии $T(p) = \frac{p^2}{2m}$ формула (4) переходит в полученную иными способами в работах [5, 8, 9].

3. Укажем другой метод разложения по \hbar^2 в любом требуемом приближении. Подобно [6] преобразуем шпур:

$$\text{Sp } e^{-\beta \hat{H}} = \int dp \langle p | e^{-\beta \hat{H}} | p \rangle = \int \int \frac{dp dx}{2\pi\hbar} e^{-\beta H(p, x)} \chi(\beta, x, p),$$

где $\chi(\beta, x, p)$ удовлетворяет уравнению $\frac{\partial \chi}{\partial \beta} = \hat{A} \chi$ с $\chi_{\beta=0} = 1$, или в более удобной интегральной форме:

$$\chi(\beta, x) = 1 + \int_0^\beta d\beta_1 \hat{A}(\beta_1) \chi(\beta_1, x), \quad (5)$$

$$\hat{A}(\beta) = \exp[\beta H(p, x)] \left[H(p, x) - H\left(p - i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \right] \exp[-\beta H(p, x)].$$

Разложение по степеням \hbar для χ из (5) в случае (2), когда

$$\hat{A}(\beta) = e^{\beta U(x)} \left[T(p) - T\left(p - i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \right] e^{-\beta U(x)},$$

приводит в первом исчезающем приближении к соотношению (4), а продолжая разложение, приходим к поправкам более высокого порядка (\hbar^4 и т. д.) в правилах квантования. Наконец, можно применить для вычисления шпура метод работы [7].

Следует отметить, что не только в книгах по квантовой механике [1—3], но и в монографиях по ВКБ-методу [4] поправки к правилам квантования Бора — Зоммерфельда не приводятся. Лишь в журнальных работах имеются правила квантования во втором [3, 9, 10] и третьем [8] приближении для квадратичного закона дисперсии и потенциала без особенностей, а в случае особенностей уточненные правила квантования могут быть получены на основании результатов работ [11].

Правила квантования (4) содержат в левой части асимптотическое разложение, так что возникает вопрос о числе поправок для достижения наилучшей точности, особенно при расчете основного и слабо возбужденных уровней энергии. Обычно принято считать, что правила квантования Бора — Зоммерфельда (первое квазиклассическое приближение) дают хорошую точность лишь при $n \gg 1$. Однако оценки с помощью ЭВМ [8] и на основе допускающих точный расчет моделей показывают, что даже для основного уровня энергии относительная ошибка оказывается порядка 1—10%, а уже для первого возбужденного она уменьшается почти на порядок. Поправка же в правилах квантования (второе квазиклассическое приближение) мала и значительно увеличивает точность, так что может служить как для оценки первого приближения, так и для фактических расчетов. Следующие поправочные члены, вообще говоря, не улучшают точности (для основного уровня энергии).

4. Нефункциональный подход (НФП) оказывается менее громоздким, чем обычно используемые способы получения квазиклассических правил квантования (особенно для первого и второго приближений). Причем существенно, что решение задачи о спектре энергии в рамках НФП не ограничивается квадратичным законом дисперсии или даже гамильтонианом вида (2), хотя и требуется, чтобы, например в случае (2), $U(x)$ и $T(p)$ были плавными функциями своих аргументов, так как фактически разложение ведется по нарастающим производным. Достоинством является также возможность использовать подобный НФП в расчете других характеристик системы: энергетической плотности состояний, распределений по координатам и по импульсам, средних значений и т. п. Причем не только для одномерных, но и для многомерных одночастичных и многочастичных систем как в чистых стационарных состояниях, так и в термодинамически равновесных. Так, с помощью формулы (3) легко вычислить плотность вероятности координат. Кроме того, точная запись правил квантования (1) допускает применение других приближений (не только квазиклассического).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] А. С. Давыдов. Квантовая механика, «Наука», М., 1973; А. Ю. Глауберман. Квантовая механика, изд. Львовского ун-та, 1962. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, «Наука», М., 1974. [3] А. Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории, «Наука», М., 1975. [4] Н. Фреман, П. У. Фреман. ВКБ-приближение, «Мир», М., 1967; Дж. Хединг. Введение в метод фазовых интегралов, «Мир», М., 1965. [5] P. N. Argyres. Physics, 2, 131, 1965. [6] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, «Наука», М., 1964. [7] И. М. Халатников. ДАН СССР, 87, 539, 1952. [8] J. B. Knieger, M. L. Lewis, C. Rosenzweig. J. Chem. Phys., 47, 2942, 1967. [9] Н. И. Жирнов. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 25, 1968. [10] C. L. Beckel, J. Nakleh. J. Chem. Phys., 39, 94, 1963. [11] В. В. Ульянов. УФЖ, 18, 1848, 1973; Изв. вузов СССР, Физика, № 3, 126, 1975.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
24 мая 1976 г.,
в окончательной редакции —
21 июня 1976 г.

УДК 535.41

Б. Ш. ПЕРКАЛЬСКИС, Ю. П. МИХАЙЛИЧЕНКО

ДЕМОНСТРАЦИИ ПО КУРСУ ФИЗИКИ

1. Призма Глана—Фуко для СВЧ излучения

Использование древесины позволяет удобно осуществить не только двупреломляющие призмы, но и поляризующие типа Николя, Аренса, Глана — Фуко и т. п. В качестве заменителя канадского бальзама в этом случае нужен диэлектрик с $n = 1,4$, ибо для используемого сорта древесины $n_e = 1,47$, $n_o = 1,35$. Учитывая, что слой диэлектрика нужен довольно толстый, порядка λ , видим, что задача не слишком проста. Решить ее, видимо, можно, пользуясь парафином ($n = 1,5$ для $\lambda = 32$ мм), в который помещен пенопласт в таком количестве, чтобы снизить n до 1,4 за счет наличия воздуха.

Для призмы Глана — Фуко эти проблемы отпадают, поскольку в ней используется воздушный зазор. Нами применены две прямоугольные призмы с острым углом 45° , вырезанные как показано на рис. 1. Поскольку угол падения на воздушный зазор больше предельного угла для необыкновенного луча, то он претерпевает полное отражение, а обыкновенный отражается лишь частично. Поэтому на продолжении падающей волны

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

6·77

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

Краткие сообщения и письма в редакцию

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, А. Г. ПЕДАН, Ю. С. ДОВМАН

О ЛОКАЛЬНЫХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ

1. Рассеяние медленных частиц локальными областями эффективного притяжения носит в квантовой механике резко выраженный резонансный характер при появлении связанных состояний. Известно [1, 2], что трехмерный локальный потенциал (в отличие от дву- и одномерного) малой величины и размеров в отсутствие магнитного поля [3] не образует связанных состояний и оказывает слабое рассеивающее действие. Представляет интерес расчет параметров, при которых впервые возникает связанное состояние, для моделей потенциала (полостей) со скачком на границе произвольной формы между областями постоянного значения. Точное решение такой задачи возможно для сферической полости [1, 2] (о плавных сферически-симметричных потенциалах см. в [4]). Даже для прямоугольной модели, в частности кубической, задача не допускает разделения переменных и точного решения (о приближенном методе для глубокой ямы см. в [5]).

2. Для оценки критических (пороговых) параметров полостей произвольной формы целесообразно использовать интегральное уравнение для волновой функции связанного стационарного состояния, которое в случае квадратичного изотропного закона дисперсии частицы с эффективной массой m в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ с полной энергией $E = -|E|$ в координатном представлении можно записать [6] в виде

$$\Psi(\mathbf{r}') = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int dV \frac{U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}. \quad (1)$$

Для потенциала со скачком U_0 на границе области Ω (полости)

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} -U_0, & \mathbf{r} \in \Omega, \\ 0, & \mathbf{r} \notin \Omega \end{cases} \text{ получаем } \Psi(\mathbf{r}') = A \int_{\Omega} \frac{dV \Psi(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (2)$$

где $A \equiv \frac{mU_0}{2\pi\hbar^2}$. Рассмотрим два пути решения задачи. Для нахождения только критической глубины потенциала учтем, что волновая функция основного состояния не имеет узлов, а для только появившегося уровня энергии к тому же слабо изменяется внутри полости, так что ее можно разложить под знаком интеграла в ряд вблизи начала координат, помещенного в центре $\left(\int_{\Omega} \frac{dV}{r} x_{1,2,3} = 0\right)$ полости. Тогда, полагая

в (2) $\mathbf{r}' = 0$, в первом приближении для критического значения A , при котором появляется ($E \rightarrow -0$) первое связанное состояние, имеем

$$A^{-1} = \int_{\Omega} \frac{dV}{r} = \frac{1}{2} \oint \frac{rdS}{r}, \quad (3)$$

где второй интеграл берется по ограничивающей полость поверхности. Для изотропных полостей, когда имеются оси симметрии x_1, x_2, x_3 выше второго порядка („сферовой волчок“), следующие члены разложения дают

$$A^{-1} = \int_{\Omega} \frac{dV}{r} - \frac{2\pi}{3} \int_{\Omega} r dV / \int_{\Omega} \frac{dV}{r} = \frac{1}{2} \oint \frac{rdS}{r} - \frac{\pi}{3} \oint r r dS / \oint \frac{rdS}{r}. \quad (4)$$

Для оценки точности полученных выражений (3) и (4) сравним известное [1, 2] значение параметра $A^{-1} = \frac{16}{\pi} R^2$ для сферы радиуса R с рассчитанным по формуле

первого приближения (3), где $A^{-1} = 2\pi R^2$, так что относительная ошибка для A равна -19% , а применение формулы (4) дает $A^{-1} = \frac{5}{3} \pi R^2$ и доводит ошибку до $-2,7\%$.

3. Второй путь связан с симметризацией ядра однородного интегрального уравнения Фредгольма второго рода (1) и использованием экстремальных свойств его собственных значений [7], на основе которых получаются вариационные оценки. Полагая $U(r) = -U_0 u(r)$, $\Phi(r) = \sqrt{u(r)} \Psi(r)$,

$$G(r, r') = \frac{\sqrt{u(r)u(r')}}{|r-r'|} \exp(-\alpha|r-r'|),$$

приходим к уравнению $\Phi(r') = A \int dV G(r, r') \Phi(r)$. Не приводя общего результата вариационной оценки собственных значений такого уравнения, выпишем формулу для критической величины A , соответствующую простейшему выбору пробной функции $\Psi = \text{const}$ внутри полости объемом v :

$$A^{-1} = \frac{1}{v} \iint \frac{dV dV'}{|r-r'|} = -\frac{1}{2v} \oint \oint dS dS' |r-r'|. \quad (5)$$

Судить о точности такой аппроксимации поможет подобное проведенному выше сравнение найденного по формуле (5) значения $A^{-1} = \frac{8}{5} \pi R^2$ для сферической полости с точным. Относительная ошибка для A при этом равна $+1,3\%$. Таким образом, формула (3) удобна для качественного исследования, а для количественных подсчетов можно использовать формулу (5).

В качестве примера рассмотрим полость в форме куба с ребром l . По формуле (4) $Al^2 = 0,51$, а из (5) $Al^2 = 0,53$, так что пороговая глубина полости кубической формы должна быть близка к значению $U_0^l = 1,05 \frac{\pi \hbar^2}{ml^2}$. Интересно сравнить этот

результат с соответствующим значением для сферы $U_0^R = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}$ при одинаковых объемах. Оказывается, что $U_0^l > U_0^R$, т. е. сферическая форма благоприятствует образованию связанного состояния (анизотропия, асимметрия разрушает финитность). Этот вывод является общим. Так, исследование критической глубины на условный экстремум в классе произвольных вариаций формы полости при постоянном объеме приводит к сфере. При этом вторая вариация критической глубины при деформации сферы, например, в эллипсоиды с полуосями $R + \delta a$, $R + \delta b$, $R + \delta c$, равна

$$\delta_2 U_0 = \frac{0,3}{R^2} U_0^R [\delta a)^2 + \delta a \delta b + (\delta b)^2].$$

Аналогичным образом можно убедиться, что размытие границ полости (модель сглаженного потенциала) также препятствует образованию связанного состояния. То же касается отклонения квадратичного закона дисперсии $\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3}$ от изотропного при $m_1 \cdot m_2 \cdot m_3 = \text{const}$.

Если глубина потенциала $U_0 + \Delta U$ незначительно отличается от пороговой U_0 , то вариационный метод при $\Delta U > 0$ дает $\alpha = \frac{\Delta U}{vAU_0}$, т. е. энергия связи

$|E| \sim \left(\frac{\Delta U}{U_0}\right)^2$ (для центральных полей это свойство отмечено в [4]), а теория рассеяния позволяет установить связь между критическими параметрами полости и значительно превосходящим классическое полным сечением резонансного рассеяния (на виртуальном уровне при $\Delta U < 0$ и на реальном при $\Delta U > 0$) медленных частиц с энергией E в соответствии с формулой Вигнера [1]:

$$\sigma = 4\pi \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \left(\frac{\Delta U}{vAU_0} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (6)$$

4. Отметим также, что уравнение (1) в n -мерном случае принимает вид

$$\Psi(r') = - \frac{m \kappa^{\frac{n}{2}-1}}{2^{\frac{n}{2}-1} \pi^{\frac{n}{2}} \hbar^2} \int dV \frac{U(r) \Psi(r)}{|r-r'|^{\frac{n}{2}-1}} K_{\frac{n}{2}-1}(\kappa |r-r'|), \quad (7)$$

где $K_a(z)$ — функция Макдональда [8]. При $n \geq 3$ получаем подобно (4)

$$A^{-1} = \int_{\Sigma} r^{2-n} dV - \frac{2 \pi^{n/2}}{n \Gamma\left(\frac{n}{2}-1\right)} \int_{\Sigma} r^{4-n} dV \left/ \int_{\Sigma} r^{2-n} dV \right.,$$

$$A \equiv \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}-1\right)}{2 \pi^{n/2}} \cdot \frac{m U_0}{\hbar^2}, \quad (8)$$

$\Gamma(z)$ — гамма-функция. В частности, для гиперсферы критическая глубина равна $U_0^R = \frac{2n(n-2)}{n+2} \cdot \frac{\hbar^2}{m R^2}$ (с относительной ошибкой — 8% при $n=4$, растущей с увеличением n). Точное критическое значение $\hbar \kappa_0 = \sqrt{2m U_0}$ определяется нулями функций Бесселя: $J_{\frac{n}{2}-2}(\kappa_0 R) = 0$. Если $n \gg 1$, то $U_0^R = \frac{n^2 \hbar^2}{8m R^2}$. Вариационный метод вместо (5) дает

$$A^{-1} = \frac{1}{v} \iint_{\Sigma} \frac{dV dV'}{|r-r'|^{n-2}}. \quad (9)$$

Наконец, подчеркнем, что развитые методы позволяют решать пороговые задачи и в случае нескольких полостей, что существенно в теории энергетического спектра примесных и неупорядоченных систем [9].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., «Наука», 1974.
 [2] А. С. Давыдов. Квантовая механика, М., «Наука», 1973. [3] Ю. А. Бычков. ЖЭТФ, 39, 689, 1960; Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев. ЖЭТФ, 49, 257, 1965.
 [4] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., «Наука», 1971. [5] В. В. Ульянов, С. Е. Кальной. Изв. вузов СССР. Физика, № 3, 147, 1975. [6] Ф. М. Морс, Г. Фешбах. Методы теоретической физики, I, М., ИЛ, 1958. [7] Ф. Трикоми. Интегральные уравнения, М., ИЛ, 1960. [8] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, 2, М., «Наука», 1966. [9] И. М. Лифшиц. УФН, 83, 617, 1964.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
26 октября 1976 г.

УДК 536.641

В. А. САФРОНОВ, А. П. РЫЖЕНКОВ

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ ОРГАНИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Зависимость параметров элементарной ячейки твердых растворов от концентрации является существенным фактором, на основании которого можно судить о характере и закономерностях распределения примеси в кристаллической решетке растворителя.

В основе разработанной методики лежит метод атом-атомных потенциалов Китайгородского и правило Вегарда [1]. В соответствии с правилом Вегарда зависимость величины параметров элементарной ячейки твердого раствора от его состава имеет линейный характер

$$a = a_1 x_1 + a_2 x_2, \quad (1)$$

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

9·77

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

ЛИТЕРАТУРА

[1] С. Т. Cunningham. Phys. Rev., **Д12**, № 2, 1975. [2] R. H. Price. Phys. Rev., **Д5**, 2419, 2445, 1972. [3] R. Fabbri. Phys. Rev., **Д 12**, 933, 1975. [4] С. Misner, K. Thorne, I. Wheeler «Gravitation», San Fransisco, 1973.

Казанский госуниверситет

Поступило в редакцию
22 ноября 1976 г.,
в окончательной редакции —
10 мая 1977 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, Е. В. КИЧИГИНА, М. С. ПЕРЕЛЬМУТЕР

О НЕЛИНЕЙНЫХ НУЛЕВЫХ КОЛЕБАНИЯХ

1. Последнее время повышенный интерес к так называемым нулевым колебаниям [1, 2], являющимся одним из самых ярких квантовых эффектов, связан с разработкой теории квантовых кристаллов [3]. Нулевые колебания (НК) есть прямое следствие соотношения неопределенности Гейзенберга — качественная сторона. Количественные же их особенности весьма разнообразны. Часто НК имеют столь малую амплитуду, что отклонение от линейности (гармоничности) незначительно, хотя и здесь нелинейности присущи свои специфические черты (возможность усиления излучения [4], тепловое сопротивление и расширение [5] и т. п.).

2. Ограничимся анализом отдельного колебания системы (осциллятора). Вначале разберем случай слабой нелинейности, когда эффективный потенциал имеет вид

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4, \quad (1)$$

где ω_0 — классическая частота соответствующих гармонических (линейных) колебаний, а коэффициенты α и β отвечают, например, более высоким производным потенциала в точке $x=0$ обычного минимума. Затем будет рассмотрен пример сильной нелинейности

$$U(x) = \beta x^4. \quad (2)$$

В первом случае (1) уровни энергии можно найти и с помощью теории возмущений, считая ангармонические члены потенциала возмущением гамильтониана линейного осциллятора, что дает [1, 6] при

$$n + \frac{1}{2} \ll \frac{m^2 \omega_0^3}{\hbar \beta}, \frac{m^3 \omega_0^5}{\hbar \alpha^2}$$

$$E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3 \hbar^2 \beta}{2 m^2 \omega_0^3} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15 \hbar^2 \alpha^2}{4 m^3 \omega_0^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + O(\hbar^3). \quad (3)$$

В частности, нулевая энергия

$$E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2} \left[1 + \frac{3 \hbar \beta}{2 m^2 \omega_0^3} - \frac{11 \hbar \alpha^2}{4 m^3 \omega_0^4} + O(\hbar^2) \right]. \quad (4)$$

Однако интересно выполнить расчет на основе квазиклассического приближения, чтобы оценить его эффективность сравнением с теорией возмущений, а также выяснить смысл поправочных членов в (4). Правила квантования второго ВКБ-приближения могут быть записаны [7—9] в виде

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint U'' p dx = h \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Оказывается, что такое приближение дает в (3) нелинейный член, не зависящий от энергии и в симметричном случае $\alpha=0$ составляющий половину ангармонизма в нулевой энергии (4). Отметим две особенности энергетического спектра. Во-первых, энергия НК связана с классической частотой при этой энергии по правилу

$$E_0 = \frac{\hbar \omega_{\text{кл}}(E_0)}{2} \left[1 + \frac{\hbar \alpha^2}{m^3 \omega_0^4} + O(\hbar^2) \right]. \quad (6)$$

Во-вторых, если плотность уровней энергии описывать величиной $\frac{dn}{dE} = \frac{1}{\hbar\omega_{\text{кв}}}$, то квантовая частота [10] $\omega_{\text{кв}}$ согласно (5) совпадает с классической в рассматриваемом приближении для всех энергий:

$$\omega_{\text{кв}}(E) = \omega_{\text{кл}}(E) + O(\hbar^2). \quad (7)$$

В качестве еще одной характеристики НК выбираем амплитуду, мерой которой в квантовой картине может служить неопределенность координаты (и импульса). Параметрическое варьирование выражения (3) дает

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_n &= \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{3\hbar^2\beta}{m^3\omega_0^4} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) + \frac{15\hbar^2\alpha^2}{m^4\omega_0^6} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + O(\hbar^3), \\ \langle p^2 \rangle_n &= \hbar m\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3\hbar^2\beta}{m\omega_0^3} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15\hbar^2\alpha^2}{2m^2\omega_0^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + O(\hbar^3), \end{aligned}$$

а в асимметричном случае $\alpha \neq 0$, кроме того, расчет по теории возмущений приводит к среднему положению $\langle x \rangle_0 = -\frac{3\hbar\alpha}{2m^2\omega_0^3}$, отличному от точки минимума потенциала. Тогда для средних квадратичных отклонений имеем

$$\begin{aligned} \Delta x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0} \left[1 - \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega_0^3} + \frac{13\hbar\alpha^2}{4m^3\omega_0^5} + O(\hbar^2) \right]}, \quad \Delta p_0 = \sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}} \times \\ &\times \left[1 + \frac{3\hbar^2\beta}{2m^2\omega_0^3} - \frac{11\hbar\alpha^2}{4m^3\omega_0^5} + O(\hbar^2) \right], \end{aligned} \quad (8)$$

а их произведение равно

$$\Delta p_0 \Delta x_0 = \frac{\hbar}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\hbar\alpha^2}{m^3\omega_0^5} + O(\hbar^2) \right], \quad (9)$$

т. е. в симметричном случае в принятом приближении оно такое же, как и у линейных колебаний (изменения Δp_0 и Δx_0 взаимно компенсируются), а для вычисления поправок в скобках (9) порядка \hbar^2 нужно учесть и отброшенные в (1) члены. Асимметрия же несколько увеличивает линейный результат в соответствии с общим соотношением Гейзенберга $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$, минимизации которого отвечают, в частности, линейные НК.

3. Для сильной нелинейности (2) рассчитанная на основе уточненных квазиклассических правил квантования (5) нулевая энергия $E_0 = A \frac{\hbar^{4/3} \beta^{1/3}}{(2m)^{2/3}}$, где $A = \frac{\pi^2}{\Gamma^{8/3}(1/4)} \times \left(\frac{3}{2} \right)^{4/3} \left(1 + \frac{4}{9\pi} \right) = 0,99$, Γ — гамма-функция, отличается от полученного с помощью ЭВМ [6] точного значения с $A = 1,06$ на 6,5 % (применение первого ВКБ-приближения даёт относительную ошибку — 18 %). Нулевая энергия связана с классической частотой для этой же энергии по правилу

$$E_0 = 0,44\omega_{\text{кл}}(E_0). \quad (10)$$

Квантовые же частоты согласно формуле (5) равны

$$\omega_{\text{кв}}(E) = \omega_{\text{кл}}(E) \left[1 - \frac{3\pi^2}{4\Gamma^4(1/4)} \cdot \frac{\hbar^2\beta^{1/2}}{mE^{3/2}} + O(\hbar^4) \right], \quad \omega_{\text{кв}}(E_0) = 0,92\omega_{\text{кл}}(E_0). \quad (11)$$

Наконец, для нахождения амплитуды нулевых колебаний воспользуемся вторым квазиклассическим приближением в рамках нефункционального подхода [9], что дает

$$\langle x^2 \rangle_n = \sqrt{\frac{E_n}{\beta}} \cdot \frac{8\pi^2}{\Gamma^4(1/4)} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2\beta^{1/2}}{32mE_n^{3/2}} \left[\frac{24\pi^2}{\Gamma^4(1/4)} - \frac{\Gamma^4(1/4)}{24\pi^2} \right] + O(\hbar^4) \right\}.$$

Согласно теореме вириала $\langle p^2 \rangle_n = \frac{4}{3} mE_n$. Отсюда $\Delta x_0 = 0,66 \hbar^{1/3} (2m\beta)^{-1/6}$, $\Delta p_0 = 0,84 \hbar^{2/3} (2m\beta)^{1/6}$, а произведение их равно

$$\Delta p_0 \Delta x_0 = \frac{\hbar}{2} \cdot 1,1. \quad (12)$$

4. Рассмотренные примеры слабой и сильной нелинейности позволяют сделать некоторые общие выводы о свойствах нулевых колебаний. Наиболее чувствительными к нелинейности оказываются амплитуды (8) и правило связи (6) и (10) нулевой энергии с соответствующей классической частотой. Произведение неопределенностей (9) и (12) близко к минимально возможному значению даже в случае сильной нелинейности. Структура энергетического спектра хорошо аппроксимируется классической частотой колебаний (7) и (11). Асимметрия усиливает влияние нелинейности.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., «Наука», 1974. [2] А. С. Давыдов. Квантовая механика, М., «Наука», 1973. [3] Квантовые кристаллы, М., «Мир», 1975; М. И. Каганов, И. М. Лифшиц. Квазичастицы, М., «Наука», 1976. [4] И. И. Собельман, И. В. Тютин. УФН, **79**, 595, 1963. [5] Г. Лейбфрид, В. Людвиг. Теория ангармонических эффектов в кристаллах, М., ИЛ, 1952. [6] З. Флюгге. Задачи по квантовой механике, М., «Мир», 1974. [7] J. V. Krieger, M. L. Lewis, C. Rosenzweig. J. Chem. Phys., **47**, 2942, 1967. [8] Н. И. Жирнов. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 25, 1968. [9] В. В. Ульянов, А. И. Халаявин. Изв. вузов СССР, Физика, № 11, 148, 1976. [10] В. В. Ульянов. УФЖ, **18**, 1848, 1973.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
17 января 1977 г.

УДК 621.382.3

Д. А. СЕЧЕНОВ, А. Г. ЗАХАРОВ, Г. М. НАБОКОВ

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МДП-СТРУКТУР, СФОРМИРОВАННЫХ НА КРЕМНИИ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ДИСЛОКАЦИЙ

В работе [1] исследовались МДП-структуры на основе дислокационного кремния и сделана попытка объяснить полученные результаты, исходя из ридовской модели краевой дислокации. Показано, что высокие плотности дислокаций существенно влияют на поведение вольт-фарадных характеристик.

С целью подтверждения предложенного механизма влияния дислокаций высокой плотности на электрофизические свойства МДП-структур в настоящей работе проведены дальнейшие исследования. По методике [1] были изготовлены две партии МДП-структур на электронном кремнии марок КЭФ-1, КЭФ-5, КЭФ-25 и КЭФ-30. Толщина окисной пленки SiO_2 МДП-структур в первой партии составляла величину 0,49 мкм, во второй — 0,1 мкм. Каждая партия состояла из двух групп МДП-структур: первая группа — на основе пластин кремния с исходной плотностью дислокаций $N_d = 2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$, вторая группа — на основе пластин кремния с $N_d = 1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$.

Вольт-фарадные характеристики измерялись мостовым методом по точкам на приборе Л2-7 и автоматически на установке, аналогичной [2]. Низкотемпературные измерения до $T = -150^\circ\text{C}$ проводились на установке АХК-5, а при температуре кипящего азота $T = 195^\circ\text{C}$ — в специальном термостате на частоте 1 МГц. На рис. 1 показаны усредненные вольт-фарадные зависимости МДП-структур с толщиной окисла $d = 0,1 \text{ мкм}$.

Видно, что наличие дислокаций высокой плотности в кремниевой пластине приводит к сдвигу вольт-фарадных характеристик МДП-структур вдоль оси напряжений в сторону более положительных значений напряжения. Заметно также снижение минимума величины дифференциальной емкости МДП-структур с ростом плотности дислокаций.

О степени температурной нестабильности МДП-структур на кремнии с различной плотностью дислокаций можно судить по значениям коэффициентов перекрытия $K_p = C_{\text{макс}}/C_{\text{мин}}$ при соответствующей температуре и по температурному коэффициенту емкости $K_{\text{ст}} = \frac{1}{C} \cdot \frac{\Delta C}{\Delta T}$. Так, в интервале температур $+25 - +95^\circ\text{C}$ ($\Delta T = 70^\circ\text{C}$)

температурные коэффициенты емкости МДП-структур на кремнии КЭФ-5 с плотностью дислокаций $N_d = 1 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$ ($U = -20 \text{ В}$) и $N_d = 1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ ($U = -7,5 \text{ В}$) равны соответственно $K_{\text{ст}} = 0,21 \% \text{ град}^{-1}$ и $K_{\text{ст}} = 0,49 \% \text{ град}^{-1}$. В интервале температур $-150 - +25^\circ\text{C}$ ($T = 175^\circ\text{C}$) — $K_{\text{ст}} = 0,08 \% \text{ град}^{-1}$ и $K_{\text{ст}} = 0,32 \% \text{ град}^{-1}$.

Значения коэффициентов перекрытия в зависимости от температуры приведены в таблице. Видно, что зависимость K_p от температуры усиливается с увеличением плотности дислокаций в кремнии.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

9·77

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

ности ПЭС в максимумах увеличиваются (рис. 1). Если учесть, что после отжига значение $\frac{\delta}{\epsilon_1}$ увеличивается до 10—12Å, то энергетическое смещение максимумов в сторону потолка валентной зоны согласуется с результатами, полученными в работе [5], в которой показано, что для прижимных контактов металл—кремний с увеличением толщины окисла максимум плотности ПЭС сдвигается в сторону валентной зоны. Наблюдаемое же увеличение плотности ПЭС в максимумах отличается от результатов, полученных в [5], где наблюдалось уменьшение плотности ПЭС при увеличении толщины окисла. Наблюдаемое увеличение плотности ПЭС может быть следствием того, что при отжиге одновременно с увеличением толщины окисла происходит диффузия никеля сквозь слой SiO_2 к границе раздела SiO_2 — $n\text{Si}$ [3].

ЛИТЕРАТУРА

[1] В. И. Стриха, Е. В. Бузанева, В. И. Радзиевский. Полупроводниковые приборы с барьером Шоттки, 1974. [2] И. Д. Романова, Н. К. Максимова, Е. Н. Пекарский, М. П. Якубеня. Изв. вузов СССР, Физика, № 4, 151, 1976. [3] О. П. Канчуковский, В. А. Преснов, Е. Н. Щедролосев. Электронная техника, серия «Полупроводниковые приборы», вып. 10, 60, 1975. [4] В. Е. Григорьев, О. П. Канчуковский, С. Б. Казимирский, Л. В. Мороз, В. А. Преснов, А. Л. Шенкевич. Техника средств связи, серия «Радиоизмерительная техника», вып. 1, 72, 1976. [5] В. И. Стриха. Теоретические основы работы контакта металл—полупроводник, 1974.

Одесский госуниверситет
им. И. И. Мечникова

Поступило в редакцию
1 марта 1977 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, В. Д. БАБЕНКО

О КВАНТОВЫХ ЧАСТОТАХ

1. Квазиклассическое соотношение [1] для расстояния между соседними уровнями энергии и классической частотой одномерных колебаний $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}$, являющееся одним из проявлений принципа соответствия, может быть уточнено введением [2] другой меры структуры энергетического спектра — плавной части энергетической плотности состояний $\frac{dn}{dE}$ и связанных с нею характерных частот и периодов, которые можно назвать квантовыми:

$$\frac{dE}{dn} = \hbar \omega_{\text{кв}}, \quad h \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кв}}, \quad \omega_{\text{кв}} = \frac{2\pi}{\tau_{\text{кв}}}, \quad (1)$$

$\hbar = 2\pi\hbar$. В первом квазиклассическом приближении, когда уровни энергии определяются правилами квантования Бора — Зоммерфельда [1] $\oint p dx = h(n + \gamma)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, с некоторыми постоянными γ , зависящими от граничных условий, квантовые частоты и периоды совпадают с классическими. Исключение составляют особые случаи сильно неоднородных полей, когда в некотором критическом диапазоне энергии γ зависит от энергии, а квантовые периоды $\tau_{\text{кв}} = \tau_{\text{кл}} - h \frac{d\gamma}{dE}$ могут существенно отличаться от классических, так как добавка $-h \frac{d\gamma}{dE}$ компенсирует или сглаживает особенности $\tau_{\text{кл}}$ (см. [2]).

В данной работе мы рассматриваем квантовые частоты вне критической ситуации. При этом для больших n они, разумеется, близки к классическим, так что следует лишь уточнить соотношение $\omega_{\text{кв}} \approx \omega_{\text{кл}}$. Особый же интерес вызывает такая связь в области малых n , для слабозбужденных уровней энергии, в частности, в окрестности нулевых колебаний.

2. Поставленная задача в случае плавного эффективного потенциала $U(x)$ может быть решена с помощью правил квантования во втором квазиклассическом приближении [3—5]

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint U'' p dx = h \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

откуда квантовые периоды и частоты равны

$$\tau_{\text{кв}} = \tau_{\text{кл}} - \frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint \frac{U'' dx}{p}, \quad \omega_{\text{кв}} = \omega_{\text{кл}} \left(1 + \frac{\hbar^2 \omega_{\text{кл}}}{48\pi} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint \frac{U'' dx}{p} \right), \quad (3)$$

где искомые квантовые поправки, как и должно быть, имеют порядок \hbar^2 .

С другой стороны, квазиклассическое разложение энергетической плотности состояний $\nu(E) = Sp \delta(E - \hat{H})$ в рамках нефункционального подхода [5] в случае плавного потенциала дает в полном соответствии с $\tau_{\text{кв}}$ в (3)

$$h\nu(E) = \tau_{\text{кл}} - \frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{U'' dx}{p}. \quad (5)$$

Обобщение на случай гамильтониана $\hat{H} = \hat{T}(p) + \hat{U}(x)$ с произвольным $T(p)$ достигается заменой в формулах (3—5) величины $\frac{1}{p}$ под знаком интеграла в поправочных членах на $\frac{T''}{T}$ (см. [5]).

Исследование поправок в правилах квантования (2) при вычислении уровней энергии, а также в выражениях (3—5) для квантовых периодов и частот показывает, что они малы даже для $n \sim 1$ и могут служить как для оценки точности первого ВКБ-приближения, так и для количественных расчетов. Так, для степенных потенциалов сравнение результатов вычислений по формуле (2) со значениями, полученными на ЭВМ [3], показывает, что даже для основного уровня энергии ($n=0$) относительная ошибка не превышает 10%, а для первого возбужденного ($n=1$) она уменьшается еще на порядок. То же касается плотности состояний (квантовых частот).

3. Если имеются особенности потенциала (например, излом или особые граничные условия), то уточнение правил квантования Бора—Зоммерфельда на основании работы [6] приводит к формуле

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \left[\oint U'' p dx - \frac{5}{6} \frac{\partial}{\partial E} \oint (U')^2 p dx \right] = h(n + \gamma). \quad (6)$$

Для плавного потенциала поправочные члены в скобках объединяются, $\gamma = \frac{1}{2}$ и формула (6) переходит в формулу (2). В соответствии с (6) квантовый период равен

$$\tau_{\text{кв}} = \tau_{\text{кл}} - h \frac{d\gamma}{dE} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{U'' dx}{p} + \frac{5\hbar^2}{24} \frac{\partial^3}{\partial E^3} \oint \frac{(U')^2 dx}{p}, \quad (7)$$

где возможное изменение γ (вне критического диапазона энергий) фактически дает дополнительную поправку тоже порядка \hbar^2 .

Для иллюстрации применения формулы (6) привлечем известный пример однородного силового поля с непроницаемой границей, описываемый линейным потенциалом $U(x) = \begin{cases} \beta x, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$ Финитной ветви движения отвечает $\gamma = \frac{3}{4}$ в формуле (6). Кста-

ти, если граничное условие соответствует обращению в ноль производной волновой функции, то в принятом приближении $\gamma = \frac{1}{4} - \frac{\hbar^2}{4\pi \sqrt{2mE^3}}$. При этом в эффективности квазиклассического приближения можно убедиться сопоставлением с точным решением задачи, где уровни энергии E_n определяются нулями v -функции Эйри по Фоку [7]. Формула (6) дает $E_n = \left(1 + \frac{5\hbar^2 \beta^2}{96mE_n^3} \right) \cdot E_n^0$, где E_n^0 берутся из первого ВКБ-приближения. В частности,

$$E_0 = \left(1 + \frac{20}{243\pi^2} \right) \cdot E_0^0, \quad E_1 = \left(1 + \frac{20}{1323\pi^2} \right) \cdot E_1^0. \quad (8)$$

Оказывается, что относительная ошибка расчета по формуле (8) даже для нулевой энергии E_0 равна +0,06%, а для E_1 она составляет -0,015%. Для квантовых частот на основании формулы (6) получаем:

$$\omega_{\text{кв}}(E) = \left(1 - \frac{5}{64} \frac{\hbar^2 \beta^2}{mE^3} \right) \omega_{\text{кл}}(E), \quad \omega_{\text{кв}}(E_0) = 0,99 \omega_{\text{кл}}(E_0). \quad (9)$$

Таким образом, даже для основного состояния относительная ошибка при замене квантовой частоты на классическую составляет всего около 1%.

4. Обычно в ВКБ-методе подчеркивается требование $n \gg 1$, хотя отмечается (например, [8]), что и для $n \sim 1$ правила квантования дают неплохую точность. Оценки показывают, что квантовая добавка к классическим частотам и периодам в формулах (3—5) и (7) мала даже для основного состояния, так что аппроксимация $\omega_{\text{кв}} \approx \omega_{\text{кл}}$ достаточно хороша для небольших n и даже для $n=0$, а $\omega_{\text{кл}}(E)$ с большой точностью описывает структуру энергетического спектра. Ошибки при этом того же порядка, что и при расчете отдельных уровней энергии в первом ВКБ-приближении.

В отличие от общепринятых представлений о роли $\omega_{\text{кл}}$ в описании структуры энергетического спектра складывается своеобразная картина: в области малых n квазиклассика дает очень хорошую точность, тогда как среди больших n могут возникнуть островки (критический диапазон [2]), где структура энергетического спектра не описывается $\omega_{\text{кл}}$.

В заключение отметим, что рассмотренные квантовые периоды и частоты непосредственно используются в статистических расчетах при переходе от сумм в квазидискретном спектре энергии к интегралам по формулам суммирования Пуассона или Эйлера, а также имеют прямой физический смысл в нестационарном пакетном движении (см. [2]).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., «Наука», 1974.
[2] В. В. Ульянов. УФЖ, 18, 1848, 1973. [3] J. В. Krieger, M. L. Lewis, C. Rosenzweig. J. Chem. Phys., 47, 2942, 1967. [4] Н. И. Жирнов. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 25, 1968. [5] В. В. Ульянов, А. И. Халявин. Изв. вузов СССР, Физика, № 11, 148, 1976. [6] В. В. Ульянов. Изв. вузов СССР, Физика, № 3, 126, 1975. [7] В. А. Фок. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн, М., «Сов. радио», 1970. [8] А. Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории, М., «Наука», 1975.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
3 марта 1977 г.

УДК 530.12.531.51

Н. М. СТЕПАНЮК

НЕКОТОРАЯ ГРУППА ТОЧНЫХ АКСИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ОТО

Получена группа точных аксиальных решений уравнений ОТО с космологическим членом Λ :

$$R_{\mu}^{\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu}^{\nu} R = -8\pi\kappa T_{\mu}^{\nu} + \Lambda g_{\mu}^{\nu}, \quad (1)$$

соответствующих некоторым частным гравитационным полям аксиальной симметрии.

Метод решения уравнений (1) представляет своеобразную комбинацию g - и T -методов решения, при котором явное выражение тензора энергии-импульса T_{μ}^{ν} не задается, а нахождение $g_{\mu\nu}$ осуществляется, исходя из вида симметрии, алгебраической структуры уравнений и некоторых координатных условий для квадратичной формы:

$$ds^2 = -e^{\lambda(r, \vartheta)} dr^2 - e^{\nu(r, \vartheta)} (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) + e^{\mu(r, \vartheta)} d\tau^2 \quad (2)$$

с последующим уточнением и проверкой физической значимости вычисленных значений компонент тензора энергии-импульса T_{μ}^{ν} .

Использованный метод решения (1) в своей принципиальной части совпадает с методом Толмена [1], а также с методом постановки решения внутренних задач ОТО по Фоку [2] и конструктивно использован во многих работах, например [3, 4, 5] и др.

Полученная группа решений (2) в «полярной» системе координат $r, \vartheta, \varphi, \tau$ для аксиальной симметрии поля имеет вид

$$ds^2 = -[1 + A(Q+B)\cos\vartheta]^{-2} \{(1 + AB\cos\vartheta)^2 (Q+B)^2 P^2 Q^{-2} dr^2 + Q^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) - (1 + AB\cos\vartheta)^2 (Q+B)^2 P^{*2} Q^{-2} d\tau^2\}, \quad (3)$$

где A, B — произвольные постоянные интегрирования;

P, P^*, Q — произвольные функции от r .

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

1.78

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

ма-спектроскопия, вып. 1, М., Атомиздат, 1968. [7] А. М. Кольчужкин, А. И. Ксенофонов, А. М. Панченко, В. Н. Потапов, В. В. Учайкин. Атомная энергия, 36, вып. 4, с. 303, 1974. [8] В. Г. Золотухин, Л. Р. Кимель, А. И. Ксенофонов, О. И. Лейпунский, А. М. Панченко. Поле излучения точечного мононаправленного источника гамма-квантов, М., Атомиздат, 1974.

Томский политехнический институт
им. С. М. Кирова

Поступило в редакцию
29 апреля 1977 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, А. И. ХАЛЯВИН

О НЕФУНКЦИОНАЛЬНОМ ПОДХОДЕ В ВКБ-МЕТОДЕ. II

1. В первой части работы [1] были получены квазиклассические правила квантования второго приближения для одномерных ветвей финитного движения с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{T}(p) + \hat{U}(x)$ при произвольной зависимости $T(p)$, а также намечено решение других вопросов квазиклассического приближения в рамках подхода, условно названного нами нефункциональным (НФП), т. е. не использующим стандартной процедуры асимптотического разложения решений уравнения Шредингера в координатном представлении с последующим сшиванием их в различных пространственных областях [2].

В данной работе, развивая НФП, мы рассмотрим квазиклассическое разложение для вероятностей и средних значений в стационарном состоянии.

2. Прежде всего разберем вопрос о вычислении средних значений функций от координат $f(x)$. Каким образом можно найти такие средние $\langle f \rangle_n$ в обычном функциональном подходе ВКБ-метода? Нужно получить приближенные выражения для координатной волновой функции стационарного состояния в классической и подбарьерной областях вдали от точек поворота, а также в окрестности этих точек, сшить эти асимптотики, а затем, вычислив координатный интеграл от усредняемой величины, умноженной на квадраты модулей указанных разложений волновой функции, и нормировочный интеграл в требуемом приближении, собрать и оценить все вклады от пяти (!) областей интегрирования.

Гораздо проще выглядит расчет таких средних в рамках НФП. Удобно использовать при этом статистический оператор рассматриваемого чистого стационарного состояния в виде

$$\hat{\rho}_n = [\text{Sp} \delta(E_n - \hat{H})]^{-1} \delta(E_n - \hat{H}). \quad (1)$$

Тогда для вычисления $\langle f \rangle_n$ достаточно знать диагональные элементы матрицы плотности $\langle x | \rho_n | x \rangle = \langle x | \delta(E_n - \hat{H}) | x \rangle [\text{Sp} \delta(E_n - \hat{H})]^{-1}$. Переходя к преобразованию Лапласа для δ -функции Дирака $\delta(E - H) \doteq e^{-\beta H}$, сводим задачу к нахождению

матричных элементов экспоненты $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle$, в которых используем приближенную симметризацию (см. [1])

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{(-\beta/2)\hat{U}} e^{-\beta \hat{T}} e^{(-\beta/2)\hat{U}} \left[1 + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24} (\hat{U}')^2 \hat{T}'' - \frac{\hbar^2 \beta^3}{12} \hat{U}'' (\hat{T}')^2 + O(\hbar^3) \right]$$

и оставляем только члены порядка \hbar^2 . Тогда

$$\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left[1 + \frac{\hbar^2 \beta^3}{24} (U')^2 T'' - \frac{\hbar^2 \beta^3}{12} U'' (T')^2 \right] e^{-\beta H(p, x)}.$$

Возвращаясь к оригиналу преобразования Лапласа, где β переходит в $\frac{\partial}{\partial E_n}$, имеем в случае квадратичного закона дисперсии

$$\langle x | \delta(E_n - \hat{H}) | x \rangle = \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2U'' \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} - (U')^2 \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \right\} \frac{\Theta(E_n - U)}{\pi \hbar v},$$

что приводит к следующему выражению для диагональных элементов статоператора (1):

$$\langle x | \rho_n | x \rangle = \frac{2}{\tau_{\text{кв}}} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2U'' \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} - (U')^2 \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \right\} \frac{\Theta[E_n - U(x)]}{v}. \quad (2)$$

Это есть плотность вероятности координат. Штрихами отмечены производные по x , а скорость $v = \sqrt{\frac{2}{m} [E_n - U(x)]}$. Нормировочная величина

$$\tau_{\text{кв}}(E_n) = \oint \frac{dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint \frac{U'' dx}{v}, \quad (3)$$

называемая в дальнейшем квантовым периодом, также содержит члены порядка \hbar^2 , однако объединять их с аналогичными поправками в скобках (2) нецелесообразно, поскольку при этом теряется смысл отдельных вкладов и всей структуры разложения в целом. Возникнув в процессе получения формулы (2), квантовый период $\tau_{\text{кв}}$ имеет самостоятельный смысл. Так, независимое от рассматриваемой задачи квазиклассическое разложение энергетической плотности состояний $\nu(E) = \text{Sp} \delta(E - \hat{H})$, содержащее, естественно, только плавную часть такой сингулярной функции энергии и не улавливающее осцилляций, имеет вид

$$h\nu(E) = \oint \frac{dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{U'' dx}{v}, \quad (4)$$

что совпадает с $\tau_{\text{кв}}(E)$ (эта же величина при $E = E_n$ стоит в формуле (1) нормировочным множителем). Такая связь квантового периода с плотностью уровней энергии вытекает и из формулы (4) работы [1] для правил квантования во втором ВКБ-приближении: $\tau_{\text{кв}} = h \frac{dn}{dE}$ или $\frac{dE}{dn} = \hbar \omega_{\text{кв}}$, $\omega_{\text{кв}} = \frac{2\pi}{\tau_{\text{кв}}}$, чем уточняется [3] обычное соотношение для расстояния между соседними уровнями энергии и классической частотой колебаний $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кв}}$. Наконец, величина $\tau_{\text{кв}}$ имеет непосредственный физический смысл периода нестационарных пакетных колебаний [3].

3. Искомые средние значения $\langle f \rangle_n = \text{Sp} [\hat{f}(x) \hat{\rho}_n] = \int dx f(x) \langle x | \rho_n | x \rangle$ в соответствии с (2) равны

$$\langle f \rangle_n = \frac{1}{\tau_{\text{кв}}} \left[\oint \frac{f dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint \frac{U'' f - U' f'}{v} dx + O(\hbar^4) \right], \quad (5)$$

где основная часть есть классическое среднее для колебаний с данной квантованной энергией E_n , а квантовые добавки имеют, как и следовало ожидать, порядок \hbar^2 и содержат классические средние от производных потенциала и усредняемой величины.

Важная формула (5), видимо, ранее не была известна в ВКБ-методе. При больших значениях энергии, когда $n \gg 1$, квантовые добавки, конечно, малы по сравнению с главной, классической частью средних значений, но самое любопытное, что они остаются малыми и для небольших n , даже для $n = 0$, в чем можно убедиться на простых конкретных примерах. Так, для потенциала $U = \beta x^4$ формула (5) дает дисперсию

$$\text{координаты } \langle x^2 \rangle_n = \sqrt{\frac{E_n}{\beta}} \frac{8\pi^2}{\Gamma^4(1/4)} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2 \beta^{1/2}}{32mE_n^{3/2}} \left[\frac{24\pi^2}{\Gamma^4(1/4)} - \frac{\Gamma^4(1/4)}{24\pi^2} \right] \right\},$$

в которой квантовая добавка даже для нулевой энергии E_0 составляет лишь 4% основной, классической части (Γ — гамма-функция), а вычисление момента четвертого порядка приводит к соотношению $\langle x^4 \rangle_n = \frac{E_n}{3\beta}$, соответствующему точному правилу из теоремы

вириала (квантовые добавки в (5), включая $\tau_{\text{кв}}$, компенсируют друг друга). Еще один пример: для квадратичного потенциала, отвечающего линейному (гармоническому) осциллятору, квантовый период равен классическому, а для средних $\langle x^4 \rangle_n$ и $\langle x^6 \rangle_n$ формула (5) приводит вообще к точным значениям (начиная с $\langle x^8 \rangle_n$ уже появляются члены порядка \hbar^4), что подтверждается независимым расчетом методом вириальных соотношений [4].

4. В заключение отметим, что подобная (5) формула может быть получена и для функций от импульса (интегрирование в этом случае ведется по импульсу, а вместо скорости v войдет сила U' в соответствующих переменных), а также для корреляционных величин типа $\langle \hat{f}(x) \hat{\phi}(p) \rangle_n$. Кроме того, в случае гамильтониана с произвольной зависимостью $T(p)$ нужно в формулах (2)–(5) $\frac{1}{m}$ заменить на T'' , соответствующим образом понимая и величину скорости: $v = T'$.

Уместно также подчеркнуть, что в проблеме получения средних значений, как и в вопросе построения правил квантования энергии, рассматриваемый нефункциональный подход аналогичен методу Кубо квантовой теории неравновесных процессов (см.,

например, [5]), где тоже сразу переходят к разложениям для искоемых величин (средних значений — реакций), минуя промежуточную в такой задаче стадию кинетических уравнений.

ЛИТЕРАТУРА

[1] В. В. Ульянов, А. И. Халявин. Изв. вузов СССР, Физика, № 11, 148, 1976. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., «Наука», 1974. [3] В. В. Ульянов. УФЖ, 18, 1848, 1973. [4] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., «Наука», 1971. [5] Д. Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, М., «Наука», 1971.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
19 апреля 1977 г.
в окончательной редакции —
20 июня 1977 г.

УДК 535.33.34.37

Р. М. ФОФОНОВА, Л. В. ОРЛОВСКАЯ, Р. Т. КУЗНЕЦОВА

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ КАРБАМИДОВ

Среди алифатических карбамидов молекула мочевины отличается значительной неопределенностью как в экспериментальном обнаружении ее электронных полос поглощения, так и в их теоретической интерпретации. Вероятно, это обусловлено широко распространенной точкой зрения, что все полосы поглощения молекулы мочевины лежат в вакуумном УФ [1]. Известно [2] следующее предположение об области $n \rightarrow \pi^*$ -перехода молекулы мочевины: на основании линейной интерполяции от формальдегида (3,8 эВ) и формамида (5,7 эВ) можно ожидать для мочевины 7,6 эВ. В работе [2] эту полосу относят именно к $n \rightarrow \pi^*$ -переходу на основании *ab initio* вычисления спектра молекулы мочевины. Для формамида в области 7,3 эВ имеется поглощение, которое на основании величины коэффициента экстинкции экспериментально отнесено к $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходу [3], а квантовохимические расчеты интерпретируют эту область как $n \rightarrow \sigma^*$ - либо $n \rightarrow$ Ридберг-переходы [4].

Таблица 1

Положение и интенсивность длинноволнового поглощения
карбамидов

Соединение	Структурная формула	$\nu_{\max} \pm 500 \text{ см}^{-1}$	ϵ_{\max}
Ацетамид	$\text{CH}_3 > \text{C}=\text{O}$ NH_2	48000	160
Формамид	$\text{H} > \text{C}=\text{O}$ NH_2	48000	30 [5]
Мочевина	$\text{NH}_2 > \text{C}=\text{O}$ NH_2	45000	0,25

Нами было предпринято изучение электронных спектров ряда карбамидов методами электронной спектроскопии и квантовой химии с целью определения положения длинноволнового поглощения молекулы мочевины и интерпретации его природы. Из полученных данных следует, что самая длинноволновая полоса поглощения молекулы мочевины (45000 см^{-1}) маскируется длинноволновым крылом второй более интенсивной полосы, лежащей в вакуумном УФ. В таблице 1 указаны самые длинноволновые полосы поглощения ряда алифатических амидов, причем для ацетамида и формамида вопрос решен давно в пользу $n \rightarrow \pi^*$ -природы этой полосы поглощения [5]. Значительное отличие интенсивностей $n \rightarrow \pi^*$ -полос поглощения карбамидов (табл. 1) обусловлено, по-видимому, различной степенью некомпланарности этих соединений [6, 7],

ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

3·78

ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

$$W_{ik}(t') = \Omega_k^{-1} \int dx P_i(x) e^{t' i L} P_k(x) \quad (11)$$

и перейдем к ε -пределу в предположении существования $f_k(t)$. Применяя теорему Абеля к уравнению (10), получим

$$f_i(t) = \sum_k \lim_{t' \rightarrow -\infty} W_{ik}(t') f_k(t+t'). \quad (12)$$

На основании же свойства размешивания статистических систем

$$\int dx h(x) e^{t' i L} g(x) = \frac{1}{\Omega} \int dx h(x) \int dx g(x)$$

$t' \rightarrow \pm \infty$

$W_{ik}(t') = \Omega_i/\Omega$ при $t' \rightarrow \pm \infty$, где Ω — полный фазовый объем. Так как $\sum f_k(t) = 1$, то из (12) следует, что $f_i(t) = \Omega_i/\Omega$ в ε -пределе. Этот вывод соответствует тому, что $\{F_i(t)\}$ в процессе размешивания для любого i стремится к одному и тому же пределу или, что одно и то же, огрубленное распределение вероятностей стремится стать равномерным. Легко заметить, что операции $\Omega_i \rightarrow 0$ и $\varepsilon \rightarrow +0$ не перестановочны. В самом деле,

$$\sum_k \lim_{t' \rightarrow 0} W_{ik}(t') f_k(t+t') = \exp(iLt') f(x, t+t') = f(x, t)$$

и уравнение (10) превращается в тождество. Это явление характерно для метода НСО, что неоднократно подчеркивается в монографии [1]. При наличии однозначных интегралов движения размешивание будет происходить по соответствующей им поверхности, по которой, очевидно, нужно производить все интегрирования. В заключение отметим, что предел $\Omega_i \rightarrow 0$ может иметь место только в классической механике; в квантовом случае неравенство $\Omega_i < h^{3N}$ невозможно.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Д. Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», М., 1971. [2] Ж. де Рам. Дифференцируемые многообразия, ИЛ, М., 1956. [3] Д. Н. Зубарев, В. П. Калашников. ТМФ, 56, 345, 1971. [4] О. Г. Мишнев. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 1977.

Сибирский физико-технический институт
им. В. Д. Кузнецова
при Томском госуниверситете

Поступило в редакцию
8 июня 1977 г.

УДК 536.7

В. В. УЛЬЯНОВ, В. И. ГОРЕНЦВЕИГ

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ПАРАГАЗА. II

1. В первой части [1] работы были рассмотрены некоторые общие и низкотемпературные свойства квантовых идеальных газов с парастатистикой при произвольной зависимости плотности одночастичных состояний от энергии. В данной работе мы разберем особенности термодинамики парагазов при высоких температурах для наиболее интересного случая степенной зависимости числа состояний от энергии $\Gamma(\varepsilon) = A\varepsilon^\alpha$, $\alpha > 0$, $\varepsilon \geq 0$ (придерживаемся обозначений работы [1]). Нашей целью будет исследование квантовых обменных вкладов в термодинамические величины парагаза.

2. Для нахождения средней энергии E парагаза как функции температуры T можно воспользоваться уравнениями $E = \int_0^\infty \varepsilon \nu(\varepsilon) n^p(\varepsilon) d\varepsilon$ и $N = \int_0^\infty \nu(\varepsilon) n^p(\varepsilon) d\varepsilon$, исключив из них химический потенциал ζ , где $n^p(\varepsilon)$ — функция парараспределения (см. [1]) с превышающими r числами заполнения одночастичных состояний, а $\nu \equiv \frac{d\Gamma}{d\varepsilon}$ — энергетическая плотность этих состояний. В области высоких температур $T \gg \left(\frac{N}{A}\right)^{\frac{1}{\alpha}}$ все парагазы близки к больцмановскому газу из-за слабости обменных эффектов, связан-

ной с малыми значениями средних чисел заполнения $\langle n_k \rangle \approx \exp \frac{\zeta - \epsilon_k}{T}$ для всех ϵ_k ,

так что активность $\exp \frac{\zeta}{T} \ll 1$. При этом разложения E и N по такому малому параметру представляют собой абсолютно сходящиеся ряды $\forall \alpha$ для всех $T > T_0$, где T_0 — температура обращения в нуль химпотенциала. Переходя далее к температурному разложению, получаем для энергии выражение

$$E = \alpha N T \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha + O(T^{-2\alpha}) \right], \quad (1)$$

где $T' = \frac{1}{2} \left(\frac{N}{\alpha! A} \right)^{\frac{1}{\alpha}}$, верхний знак отвечает ферми-газу ($r = 1$), а нижний — всем

другим парагазам ($r \geq 2$). Видно, что квантовые обменные поправки к классическому результату уже для $r = 2$ имеют тот же знак, что и для бозе-газа ($r = \infty$), т. е. соответствуют эффективному притяжению. Еще одно замечание касается зависимости поправки в энергии (1) от постоянной Планка. Для свободного m -мерного парагаза при любом законе дисперсии эти поправки оказываются порядка \hbar^m . В частности, для обычного трехмерного газа они имеют порядок \hbar^3 для всех парастатистик, что для ферми- и бозе-газов специально подчеркивалось в [2] при сравнении с «силовыми» поправками, имеющими всегда порядок \hbar^2 . В других же случаях соотношения между «силовыми» и обменными вкладами могут быть иными.

Для трехмерного однородного газа, например, из формулы (1) вытекает уравнение состояния на основе связи [1] давления с энергией $\alpha P V = E$, что вновь показывает роль обменных поправок: если $r = 1$ отвечает эффективному отталкиванию с увеличением давления, то уже начиная с $r = 2$ всем парагазам присуще эффективное притяжение с уменьшенным давлением.

Зависимость химпотенциала от температуры и содержащихся в A внешних параметров

$$\frac{\zeta}{T} = -\alpha \ln \frac{T}{2T'} \pm \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha + O(T^{-2\alpha}) \quad (2)$$

(+ для $r = 1$ и — для $r \geq 2$) говорит об общем характере закона $\zeta \sim -T \ln T$ при $T \rightarrow \infty$.

3. Для теплоемкости при постоянных внешних параметрах λ выпишем высокотемпературное разложение с большей точностью, чем для энергии (1):

$$\frac{C_\lambda}{\alpha N} = \begin{cases} 1 \mp \frac{\alpha-1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha - (2\alpha-1) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{4}{3} \right)^{\alpha+1} \right] \left(\frac{T'}{T} \right)^{2\alpha}, & \text{— для } r = 1, + \text{ для } r > 2, \\ 1 + \frac{\alpha-1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha - (2\alpha-1) \left[1 + \left(\frac{4}{3} \right)^{\alpha+1} \right] \left(\frac{T'}{T} \right)^{2\alpha}, & r = 2. \end{cases} \quad (3)$$

Отброшены члены порядка $T^{-3\alpha}$. Предельному классическому случаю соответствует равная α теплоемкость на одну частицу, что обобщает известный закон о равнораспределении [3] ($1/2$ на каждый квадратичный член в функции Гамильтона и т. п.). Что касается обменных поправок в теплоемкости (3), то они еще раз иллюстрируют бозонный характер всех парагазов с $r \geq 1$, а учет членов более высокого порядка температурного разложения (3) на фоне этой общности уже выделяет парагаз с $r = 2$ (такая сепарация парагазов с разными r продолжается и далее с ростом порядка приближения).

Отметим важные частные случаи. Если $\alpha = \frac{3}{2}$ (например, обычный трехмерный газ), то получаем в согласии с известными результатами [4] (а также [2] для ферми- и бозе-газов), не выписывая вкладов более высокого порядка,

$$C_\lambda = \frac{3}{2} N \left(1 \mp \frac{N}{6 \sqrt{2\pi} A} T^{-\frac{3}{2}} \right).$$

Здесь и в следующем примере верхний знак относится к $r = 1$, а нижний к $r > 1$. Интересен также случай $\alpha = \frac{1}{2}$ (обычный одномерный газ, например), когда пропадают члены второго порядка в разложении (3):

$$C_\lambda = \frac{N}{2} \left[1 \pm \frac{N}{2 \sqrt{2\pi} A} T^{-\frac{1}{2}} + O(T^{-\frac{3}{2}}) \right].$$

При этом теплоемкость ферми-газа превышает предельное классическое значение имея необычный температурный ход с максимумом (в области промежуточных T). Наиболее же любопытен случай $\alpha = 1$ (в частности, обычный двумерный парагаз), когда исчезают первые обменные поправки в (3) и

$$\frac{|C_\lambda|}{N} = 1 - \frac{1}{36} \left(\frac{N}{AT} \right)^2 \cdot \begin{cases} 1, & r \neq 2, \\ 25, & r = 2. \end{cases} \quad (4)$$

Об удивительных особенностях этого случая для всех температур см. в [5].

Еще одна статистическая характеристика — квадратичная флуктуация числа частиц — снова подтверждает вывод о бозонных тенденциях парагазов с $r \geq 2$. Вычисление этой величины дает

$$D_N = N \left[1 \mp \frac{N}{2^\alpha \alpha! AT^\alpha} + O(T^{-2\alpha}) \right], \quad (5)$$

— для $r = 1$, + для $r \geq 2$. По сравнению с классическим [2] результатом $D_N = N$ в ферми-газе ($r = 1$) флуктуации сдерживаются [2] принципом Паули, однако аналогичный запрет с $r = 2$ в принятом приближении дает то же, что и $r = \infty$, т. е. запреты типа $r \geq 2$ фактически становятся неограничительными.

4. Таким образом, если при низких температурах все промежуточные ($1 < r < \infty$) парагазы ведут себя [1] подобно ферми-газу (у бозе-газа нет такой области температур), то при высоких температурах они имеют бозонный характер. Объясняется это тем, что при низких T реализуется возможность заполнения одночастичных состояний и любое r -ограничение чисел заполнения проявляется полностью, блокируя дальнейшую заселенность, тогда как при высоких T разброс по большому интервалу состояний не дает почувствовать такой потолок заполнения с $r \geq 2$ из-за очень малой вероятности попадания нескольких парачастиц в одно и то же состояние, когда проявляется их статистическое взаимодействие. Запреты типа $r \geq 2$ при высоких T переходят в свою противоположность, становясь разрешениями (вообще на запрет $n_{\kappa} > r$ можно смотреть как на разрешение $n_{\kappa} \leq r$).

Поучительно, что в отличие от низкотемпературного парагаза [1], общие свойства которого (как и у ферми-газа [6]) не зависят от конкретного вида плотности состояний, для исследования свойств парагаза при высоких температурах нужно знать явный вид $v(\epsilon)$ (подобно бозе-газу [7] для всех T). Наиболее важный случай степенной зависимости $v \sim \epsilon^{\alpha-1}$ и был рассмотрен нами.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. В. Ульянов, И. Б. Снапиро. Изв. вузов СССР, Физика, № 10, 152, 1975. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, М., «Наука», 1964. [3] А. И. Ансельм. Основы статистической физики и термодинамики, М., «Наука», 1973. [4] S. I. Wep-Abraham. Amer. J. Phys., 38, 1335, 1970. [5] В. В. Ульянов, С. С. Соколов. Изв. вузов СССР, Физика, № 1, 153, 1975. [6] И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов. Электронная теория металлов, М., «Наука», 1971. [7] В. В. Ульянов, М. И. Василева. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 120, 1976.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
9 июня 1977 г.

УДК 539.21

В. А. ЖДАНОВ, С. Б. ТЕОДОРОВИЧ

БЕСПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ И ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ KNa_2

Фазы Лавеса являются самой многочисленной по количеству представителей группой металлических соединений [1]. Они образуются как металлами, так и неметаллическими элементами, способными переходить в металлическое состояние путем коллективизации валентных электронов [2]. Общим для всех фаз Лавеса является доминирующая металлическая связь. KNa_2 представляет, по-видимому, простейшее соединение лавесовского типа. В настоящей работе мы проводим беспараметрический расчет функции энергии связи и параметров решетки KNa_2 на основе статистического приближения квантовой теории [3].

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

3·79

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

ЛИТЕРАТУРА

[1] Х. Керес. ЖЭТФ, 5, 46, 1964. [2] Х. Керес. ЖЭТФ, 3, 52, 1967. [3] Х. Керес. ЖЭТФ, 5, 48, 1965. [4] A. P. P. es. Phys. Rev. Lett., 3, 571, 1959.

Томский институт автоматизированных
систем управления и радиоэлектроники

Поступило в редакцию
22 марта 1978 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, В. В. БРУК

О ЛОКАЛЬНЫХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ. II

1. В первой части работы [1] рассматривались критические свойства связанных состояний в трехмерных областях локального притяжения. Здесь же мы обратимся к аналогичным эффективно одномерным задачам, а также получим общее условие существования связанных состояний в слабом поле для различных размерностей пространства и законов дисперсии. По-прежнему будем записывать стационарное уравнение Шредингера в интегральной форме, к которой приводит использование функции Грина.

2. Такое уравнение для волновой функции $\Psi(x)$ связанного состояния частицы с обычным законом дисперсии (эффективная масса m) в потенциальном $U(x)$ поле

$$\Psi(x') = - \frac{m}{\hbar^2 \kappa} \int dx U(x) \Psi(x) \exp(-\kappa|x-x'|), \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}, \quad (1)$$

есть частный случай уравнения (7) работы [1] при $n=1$. Приравняв нулю определитель Фредгольма [2] и производя разложение по степеням $\kappa a \ll 1$ (a — размер области действия поля), выводим общую формулу для величины κ в случае слабой (мелкой или узкой) потенциальной ямы с единственным связанным состоянием:

$$\kappa = - \frac{m}{\hbar^2} \int dx U(x) - \frac{m^2}{\hbar^4} \iint dx dx' U(x) U(x') |x-x'| + O(U_0^3 a^5). \quad (2)$$

Этот важный результат содержит, в частности, уточнение известного (см., например, [3], с. 196) выражения для энергии связи $|E|$. Причем формула для κ более удобна, чем непосредственная запись для $|E|$. Видно, что разложение ведется по малому параметру $ma^2 U_0/\hbar^2 \ll 1$ и охватывает как случай мелкой (малая глубина U_0), так и узкой (малый размер a) ямы. Одновременно можно найти и волновую функцию, однако ограничимся исследованием энергии связи. Заметим, что в приближении (2) κ вычисляется и с помощью вариационной оценки [4, 5] с $\Psi = \text{const}$ внутри поля (как в [1], п. 3).

Пока речь шла о моделируемой потенциальной ямой области притяжения. Возникает вопрос, как повлияют на формирование связанного состояния области отталкивания. При каких условиях связанных состояний не будет?

3. Особый интерес вызывает случай в среднем равного нулю потенциала ($\int dx U(x) = 0$). Например, когда имеются яма и барьер, взаимно компенсирующие друг друга. Любопытно, что связанное состояние все еще сохраняется, а найденное выражение (2) описывает эффект (второе слагаемое) и в этом случае. В следующем приближении на основе малости $\kappa L \sim m^2 U_0^3 a^2 L^2/\hbar^4$, где L — расстояние между неоднородностями поля, имеем

$$\kappa = - \frac{m^2}{\hbar^4} \iint dx dx' U(x) U(x') |x-x'| - \frac{m^3}{\hbar^6} \iiint dx dx' dx'' U(x) U(x') U(x'') |x-x'| |x'-x''| + O(U_0^4 a^4 L^3). \quad (3)$$

Можно показать, что $\iint dx dx' U(x) U(x') |x-x'| < 0$ при $\int dx U(x) = 0$.

Таким образом, если для отдельной ямы энергия связи имела порядок $U_0 \cdot m U_0 a^2/\hbar^2$, то для равного нулю в среднем потенциала энергия связи $|E| \sim U_0 (m U_0 a^2/\hbar^2)^3$ (считаем $L \sim a$) значительно уменьшается, как и следовало ожидать, что вызывает резонансное рассеяние при малых энергиях $\epsilon \ll \hbar^2 (ma^2)^{-1}$: коэффициент прозрачности $T = \epsilon(|E| + \epsilon)^{-1}$. Платой за возможность захвата частицы слабым полем является большая величина квантового эффекта проникновения в класси-

чески недоступную область движения $E < U(x)$ далеко за пределы ямы, на расстояние порядка $\kappa^{-1} \sim |E|^{-1/2}$, так как $\psi \sim e^{-\kappa|x|}$ вне поля.

Наконец, соотношение (2) можно использовать и для оценки таких параметров потенциала разного знака с $\int U dx > 0$, при которых возникает (исчезает) связанное состояние. В как угодно слабом одномерном поле притяжения связанное состояние существует всегда, тогда как наличие областей отталкивания — барьеров — способно вытеснить связанное состояние. Это чисто квантовое явление наблюдается при следующих значениях критических параметров поля, получаемых из формулы (2) при $\kappa \rightarrow 0$:

$$\int U(x) dx = -\frac{m}{\hbar^2} \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(U_0^3 a^4 L^3). \quad (4)$$

Прозрачность при этом становится практически полной для энергий $\epsilon \ll \hbar^2 (mL^2)^{-1}$.

Итак, выражение (2) содержит три результата: уточнение обычной формулы для энергии связи в слабом поле притяжения ($\int U dx < 0$), утверждение о сохранении связанного состояния для скомпенсированного поля ($\int U dx = 0$) и критическое условие в случае преобладания отталкивания ($\int U dx > 0$).

4. Перейдем к общей проблеме существования связанных стационарных состояний частицы в локальной области слабого притяжения $U(\mathbf{r})$ в случае n -мерного пространства (\mathbf{r}) и некоторого закона дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$. Используя резольвенту $(\epsilon - E)^{-1}$ невозмущенного гамильтониана в координатном представлении

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \equiv \langle \mathbf{r} | (\epsilon - E)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle = \int d\mathbf{p} \frac{\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle}{\epsilon(\mathbf{p}) - E}, \quad (5)$$

записываем уравнение для связанного ($E < 0$) состояния

$$(\epsilon - E) \Psi = -\hat{U} \Psi \Rightarrow \Psi = -(\epsilon + |E|)^{-1} \hat{U} \Psi \quad \text{в интегральной форме} \\ \Psi(\mathbf{r}) = -\int dV' R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'). \quad (6)$$

При квадратичном законе дисперсии явный вид такого уравнения для одномерия есть (1), а для n -мерия — уравнение (7) работы [1]. Если при $E \rightarrow -0$ предел $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ существует, то формула (6) дает условие для критических параметров потенциала, т. е. связанного состояния в достаточно слабом поле притяжения нет (методы исследования критических свойств разобраны в [1]). Если же такой предел $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ не существует, то, поскольку не меняют знака как $U(\mathbf{r})$, так и $\Psi(\mathbf{r})$ для основного состояния, а $U(\mathbf{r})$ локален, значения энергии $E = -0$ нет среди решений уравнения (6) для основного состояния, а следовательно, связанное состояние ($E < 0$) имеется всегда (пример его отыскания дан в п. 2). Сама же величина $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ при $E \rightarrow -0$ определяется в соответствии с (5) сходимостью при малых

импульсах интеграла $\int \frac{d\mathbf{p}}{\epsilon(\mathbf{p}) + |E|}$ или сходимостью $\int \frac{\nu(\epsilon) d\epsilon}{\epsilon + |E|}$ при $\epsilon \rightarrow 0$.

Отсюда для наиболее интересной степенной плотности состояний $\nu(\epsilon) \sim \epsilon^{\alpha-1}$ вытекает условие существования связанных состояний

$$\alpha \leq 1, \quad (7)$$

а при $\alpha > 1$ они появляются только при критических параметрах потенциала.

Например, для n -мерия и l -степенного закона дисперсии $\epsilon(\mathbf{p}) \sim |\mathbf{p}|^l$ имеем $\alpha = n/l$. В частности, для квадратичного закона дисперсии приходим согласно (7) к известному [3] условию $n \leq 2$: как угодно слабые одно- и двумерные поля притяжения способны удерживать частицу.

Отметим также связь условия (7) с соответствующим признаком отсутствия бозеконденсации (см. [6]). При $\alpha \leq 1$ есть связанное состояние, но нет конденсации. Физический смысл этого явления (отвечающего «реакции» квазидискретного спектра энергии на влияние локального потенциала притяжения или эффективного обменного бозе-притяжения) состоит в том, что в невозмущенном энергетическом спектре при $\epsilon \rightarrow 0$ $\forall \alpha \leq 1$ плотность состояний велика: это способствует «отщеплению» уровня энергии для образования связанного состояния, но неблагоприятно для обменного бозе-взаимодействия из-за размывания частиц по большому числу состояний вблизи энергии $\epsilon = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] В. В. Ульянов, А. Г. Педан, Ю. С. Довман. Изв. вузов СССР, Физика, № 6, 148, 1977. [2] П. П. Забрейко и др. Интегральные уравнения. М., «Наука», 1968. [3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., «Наука», 1974. [4] Ф. Трикоми. Интегральные уравнения. М., ИЛ, 1960. [5] Л. Я. Цлаф. Вариационное исчисление и интегральные уравнения, М., «Наука», 1970. [6] В. В. Ульянов, М. И. Василева. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 120, 1976.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
27 марта 1978 г.

УДК 539.17

Р. М. ГАЛИМЗЯНОВ, В. П. ИСАЕВ, М. М. МУСАХАНОВ

О ПРИМЕНИМОСТИ РЯДА ВАТСОНА В ЗАДАЧЕ π -А-РАССЕЯНИЯ ВБЛИЗИ Δ (1236)-РЕЗОНАНСА

В области Δ (1236)-резонанса величина πN -амплитуды сравнима со средними междуклонными расстояниями в ядрах. Поэтому оказался существенным вклад многократных перерассеяний π -мезона в ядре дейтерия [1]. Для более плотных ядер эти эффекты должны проявляться сильнее. В данной работе для описания $\pi^3\text{He}$ -рассеяния в районе резонанса предлагается решение системы интегральных уравнений, итерация которых воспроизводит ряд многократного рассеяния Ватсона.

Вся совокупность членов ряда Ватсона [2], описывающих перерассеяния π -мезона в системе двух нуклонов, может быть учтена путем введения вспомогательной амплитуды $\tau_{12} = \Theta_1 + \Theta_2$ так, что

$$\Theta_1 = \tau_1 + \tau_1 G \Theta_2; \quad \Theta_2 = \tau_2 + \tau_2 G \Theta_1, \quad (1)$$

где $G = (E - K_\pi - H_\pi + i\varepsilon)^{-1}$; K_π — оператор кинетической энергии π -мезона; H_π — ядерный гамильтониан; $\tau_i = V_i + V_i G \tau_i$ — амплитуда рассеяния на i -м связанном нуклоне. Затем ряд Ватсона для амплитуды рассеяния на трех нуклонах T может быть отсуммирован следующим образом:

$$T = \Theta_{12} + \Theta_3, \quad (2)$$

$$\text{где} \quad \Theta_{12} = \tau_{12} + \tau_{12} G \Theta_3; \quad \Theta_3 = \tau_3 + \tau_3 G \Theta_{12}. \quad (3)$$

В рамках адиабатического приближения ($G \rightarrow (E - K_\pi + i\varepsilon)^{-1}$) такой путь позволяет использовать результаты задачи рассеяния на двух нуклонах как промежуточные. Амплитуда рассеяния на i -м неподвижном нуклоне (адиабатическое приближение) в резонансной области энергий имеет простой сепарабельный вид:

$$\tau_i = e^{i\kappa' \cdot x_i} g(\kappa') Y_{1m}(\hat{\kappa}') b_{33} Y_{1m}^*(\hat{\kappa}) g(\kappa) e^{-i\kappa \cdot x_i}, \quad (4)$$

где g — форм-фактор схода π -мезона с массовой поверхности [3]; b_{33} — парциальная (3, 3)-амплитуда. В этих приближениях и в импульсном представлении по переменным π -мезона, и в координатном по переменным нуклонов система (1) сводится к системе алгебраических уравнений, решение которых имеет вид:

$$\tau_{12} = \sum_{i,j=1}^2 e^{i\kappa' \cdot x_i} g(\kappa') Y_{1m}(\hat{\kappa}') Z_{ij} Y_{1m}^*(\hat{\kappa}) g(\kappa) e^{-i\kappa \cdot x_j}, \quad (5)$$

$$Z_{ij} = b_{33} \frac{\delta_{ij} + V_{12} \cdot b_{33} (1 - \delta_{ij})}{1 - (V_{12} b_{33})^2}, \quad (6)$$

$$V_{12} = \int \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} j_0(q \cdot |x_1 - x_2|) g^2(q) \frac{1}{\kappa^2 - q^2 + i\varepsilon} -$$

сферически-симметричная часть обменного потенциала ΔN -взаимодействия.

Здесь пренебрегается [4] незначительной сферически-несимметричной частью обменного потенциала. Учитывая сепарабельный вид амплитуды τ_{12} , получим решение системы (3):

$$T = \sum_{\alpha,\beta=1}^3 e^{i\kappa' \cdot x_\alpha} g(\kappa') Y_{1m}(\hat{\kappa}') \varphi_{\alpha\beta} Y_{1m}^*(\hat{\kappa}) g(\kappa) e^{-i\kappa \cdot x_\beta}, \quad (7)$$

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

5·79

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

В. В. УЛЬЯНОВ, В. И. ГОРЕНЦВЕИГ

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ПАРАГАЗА. III

1. Если в первых частях [1—2] работы нас интересовали низко- и высокотемпературные свойства парагаза [3—4], то в данной части речь пойдет о промежуточных температурах, где обменные эффекты проявляются уже в достаточно сильной степени, а также о некоторых магнитных свойствах парагазов. Изучение свойств парагаза при промежуточных температурах позволяет дополнить предельные картины для низких и высоких температур. Кроме того, такое рассмотрение и для обычных ферми- и бозе-статистик дает полезные сведения о поведении наиболее интересных газов со степенной зависимостью числа состояний от энергии $\Gamma(\epsilon) = A\epsilon^\alpha$, $\epsilon \gg 0$.

2. Исследуем свойства парагаза в окрестности температуры T_0 , при которой обращается в ноль химический потенциал. Рассмотрим вопрос о самой промежуточной температуре T_0 и о поведении основных термодинамических величин в ее окрестности (на примере энергии).

Как уже отмечалось в [1], температурная шкала r -парагаза имеет в общем случае две характерные точки — граничную энергию ϵ_p , отвечающую химпотенциалу при $T = 0$, и температуру T_0 . Общее выражение для последней, получаемое из урав-

нения для полного числа частиц $N = \int_0^\infty \gamma(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon$ (см. [1]),

$$T_0^{-\alpha} = \frac{A}{N} \alpha! \zeta(\alpha) [1 - (r+1)^{1-\alpha}] \quad (1)$$

имеет неопределенность при $\alpha = 1$, раскрывая которую (здесь $\zeta(\alpha)$ — функция Римана), получим $T_0^{-1} = \frac{A}{N} \ln(r+1)$.

В зависимости от значений α и предельного числа заполнения одночастичных состояний r возможны различные варианты взаимного расположения этих точек ($T_0 \geq \epsilon_p$). В случае $r = 1$ (ферми-газ) $T_0 > \epsilon_p \equiv \epsilon_F$ при $\alpha < 3/2$; $T_0 = \epsilon_F$ при $\alpha = 3/2$ (например, трехмерный газ с квадратичным законом дисперсии), точнее $T_0 = 0,99\epsilon_F$, а при $\alpha > 3/2$ промежуточные температуры заходят в низкотемпературную область: $T_0 < \epsilon_F$. В случае $r = 2$ ситуация аналогичная, а слияние опорных точек $T_0 = \epsilon_p$ происходит при $\alpha = 2$. В случае же $r = \infty$ (бозе-газ) $\epsilon_p = 0$, т. е. низкотемпературная область захлопывается, а при $\alpha \leq 1$ и $T_0 = 0$.

Для любых фиксированных значений α и A величина T_0 убывает с ростом r , что непосредственно видно из формулы (1), записанной через соответствующую ферми-евскую температуру, $T_0 = T_0^F \left| \frac{1 - 2^{1-\alpha}}{1 - (r+1)^{1-\alpha}} \right|^\alpha$, или при $\alpha > 1$ — через бозевскую:

$$T_0 = T_0^B / \left[1 - \frac{1}{(r+1)^{\alpha-1}} \right]^\alpha.$$

Выделенное значение температуры интересно также тем, что в бозе-газе термодинамические величины при T_0 обладают особенностями для $\alpha > 1$ (возникают бозе-эйнштейновская конденсация и разного рода фазовые переходы, о чем см. в [5]). Существенно, что при T_0 основные термодинамические характеристики выражаются через интегралы, сводящиеся к достаточно простым функциям.

3. Например, расчет средней энергии E при температуре T_0 с помощью общих формул $E = \int_0^\infty \gamma(\epsilon) \epsilon n^p(\epsilon) d\epsilon$ и $N = \int_0^\infty \gamma(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon$ (см. [1]) приводит к следующему точному выражению:

$$\frac{E(T_0)}{\alpha N T_0} = \frac{\zeta(\alpha+1)}{\zeta(\alpha)} \cdot \frac{1 - (r+1)^{-\alpha}}{1 - (r+1)^{1-\alpha}}. \quad (2)$$

Величина $\alpha N T_0$ соответствует классическому значению энергии, а степень вырождения определяется правой частью формулы (2) — коэффициентом вырождения (KB), который и рассмотрим более подробно при $\alpha = 3/2$ (трехмерный газ с квадратичным законом дисперсии, например). В случае ферми-газа ($r = 1$) KB = 1,1. Физический

смысл этого результата заключается в том, что энергия увеличивается по сравнению с ее классическим значением при T_0 на 10% за счет эффективного обменного отталкивания, присущего ферми-газу. В случае парагаза с $r=2$ при том же значении α имеем $KV=0,98$. Это объясняется проявлением характерной для высоких температур [2] близости всех парагазов с $r \geq 2$ к бозе-газу. Наконец, в случае бозе-газа ($r=\infty$) $KV=0,51$. Причиной такого уменьшения энергии вдвое по сравнению с классическим значением является обменное эффективное притяжение, делающее бозе-газ существенно вырожденным уже при промежуточной температуре T_0 . Аналогично ведут себя газы с $\alpha=2$.

Любопытно, что для бозе-газа, например, высокотемпературные выражения (см. формулу (1) работы [2]) при $\alpha=3/2$ хорошо аппроксимируют поведение энергии даже вблизи T_0 , хотя уже при $\alpha=2$ согласие с точным значением ухудшается. Это объясняется тем, что с ростом α энергия бозе-газа претерпевает более резкие температурные изменения (усиливается особенность теплоемкости [5]).

4. Отметим также, что для парагазов можно вывести интересную формулу, аналогичную полученной Румером в работах [6, 7] для ферми- и бозе-газов. Для этого достаточно заметить, что средние значения чисел заполнения парагаза могут быть записаны (бозевская форма парараспределения) в виде разности двух бозе-распределений с температурами T и $\frac{T}{r+1}$ соответственно (см. формулу (1) работы [1]).

Используя для каждого из них выражение Румера [7], приходим к следующему соотношению для Ω -потенциала:

$$\Omega = - \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{d\beta Z(\beta)}{2\pi i \beta^2} e^{\beta \zeta} \frac{\pi \beta T}{\sin \pi \beta T} \cdot \frac{\sin \frac{r\pi \beta T}{r+1}}{\frac{\pi \beta T}{\sin \frac{r\pi \beta T}{r+1}}}, \quad 0 < \sigma < T^{-1}, \quad (3)$$

где $Z(\beta) = \sum_{\kappa} e^{-\beta \epsilon_{\kappa}}$ — одночастичная сумма состояний; ζ — химпотенциал. Видно, что

формула (3) отличается от фермиевского ($r=1$) выражения [6] наличием последнего множителя (отношение синусов). На основе (3), например, удобно исследовать магнитные свойства свободного парагаза при низких температурах так, как это сделано в работе [8] для ферми-газа. Осциллирующие члены за счет полюсов $Z(\beta)$ для мнимых β отделяются от плавной части, определяемой особенностью при $\beta=0$. При этом результат для осцилляций магнитных величин (эффект де Гааза — ван Альфена) сводится к следующему: амплитуда осциллирующих вкладов аналогична фермиевской

с заменой типичной функции $\Psi(x) = \frac{x}{\text{sh } x}$, $x = 2l\pi^2 T / \hbar \omega$ (l — номер гармоники; $\omega = \frac{eH}{mc}$ — циклотронная частота) на величину $\Psi(x) \text{sh} \frac{rx}{r+1} / \text{sh} \frac{x}{r+1}$, а в периоде осцилляций граничная энергия ϵ_p заменяет фермиевскую. Другой путь получения этих результатов (а также более общих — при произвольном законе дисперсии, подобно фермиевским [9]) связан с низкотемпературным разложением интегралов зоммерфельдовского типа (см. формулу (3) из [1]) с осциллирующими подынтегральными функциями.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. В. Ульянов, И. Б. Снапиро. Изв. вузов СССР, Физика, № 10, 152, 1975. [2] В. В. Ульянов, В. И. Горенцвейг. Изв. вузов СССР, Физика, № 3, 145, 1978. [3] А. Исихара. Статистическая физика. М., «Мир», 1973. [4] Ф. Кемпфер. Основные положения квантовой механики. М., «Мир», 1967. [5] В. В. Ульянов, М. И. Василева. Изв. вузов СССР, Физика, № 9, 120, 1976. [6] Ю. Б. Румер. ЖЭТФ, 18, 1081, 1948. [7] Ю. Б. Румер. ЖЭТФ, 20, 807, 1950. [8] E. Sondheimer, A. Wilson. Proc. Roy. Soc., A 210, 173, 1951. [9] И. М. Лифшиц, А. М. Косевич. ЖЭТФ, 29, 730, 1955.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
24 апреля 1978 г.

ISSN 0021—3411

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

10·80

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

Изучение кривых $F(\eta)$ для AB_3II и AB_3III показывает, что по мере уменьшения температуры (роста w/kT) у обоих структур обнаруживается сходная тенденция к упорядочению, при этом положительные значения α , при которых происходит переход порядок — беспорядок, уменьшаются, приближаясь к I. Однако у AB_3III при тех же значениях α упорядочение наступает при больших значениях температуры. Действительно, при $\alpha = 1$

$$T_{0III}/T_{0II} = w_{III}/w_{II} = 3(1 + \alpha)/(3\alpha - 1) = 3,$$

т. е. температура упорядочения T_{0III} оказывается наиболее высокой. Структура типа AB_3II у каких-либо сплавов также не обнаружена.

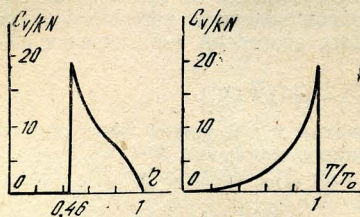


Рис. 3

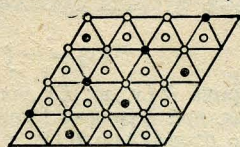


Рис. 4

Зависимость степени дальнего порядка η от температуры T в равновесном состоянии определяется выражением вида

$$2W\eta = 3kT \ln \frac{(c_A + 0,75\eta)(c_B + 0,25\eta)}{(c_A - 0,25\eta)(c_B - 0,75\eta)}.$$

Скачок степени дальнего порядка $\Delta\eta$ в точке перехода порядок — беспорядок равен 0,46, температура упорядочения определяется $T_0 = 0,14 W/k$.

Зависимость конфигурационной теплоемкости $c_v = \partial E/\partial T = -NW\eta d\eta/dT$ [4] от температуры или степени дальнего порядка может быть определена с учетом последнего соотношения. Так, например, зависимость $c_v = c_v(\eta)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{c_v}{kN} = & 3\eta \ln^2 \frac{\left(c_A + \frac{3}{4}\eta\right)\left(c_B + \frac{1}{4}\eta\right)}{\left(c_A - \frac{1}{4}\eta\right)\left(c_B - \frac{3}{4}\eta\right)} \\ = & \frac{2 \left[\eta \left(\frac{3/4}{c_A + \frac{3}{4}\eta} + \frac{1/4}{c_B + \frac{1}{4}\eta} + \frac{1/4}{c_A - \frac{1}{4}\eta} + \frac{3/4}{c_B - \frac{3}{4}\eta} \right) - \ln \frac{(c_A + 3/4\eta)(c_B + 1/4\eta)}{(c_A - 1/4\eta)(c_B - 3/4\eta)} \right]}{1} \end{aligned}$$

На рис. 3 представлены графики зависимости c_v от η и T/T_0 . Скачок теплоемкости Δc_v в точке перехода порядок — беспорядок одинаков для всех трех структур и составляет около 20 кН.

Возможно существование и других сверхструктур состава AB_3 , например, с 32 атомами в кристаллографической ячейке (рис. 4), некоторые из них при $w > 0$ и $w' > 0$ могут оказаться более вероятными в сравнении с рассмотренными структурами AB_3I и AB_3II .

ЛИТЕРАТУРА

[1] З. А. Матысина, А. А. Смирнов, УФЖ, 5, 578, 1960. [2] Г. Шульце. Металлофизика. Мир, 1971. [3] З. А. Матысина, Э. А. Матысина, А. Л. Чикаренко. Тезисы докладов VIII Всесоюзной конференции по физике прочности и пластичности металлов и сплавов, с. 172, Куйбышев, 1976. [4] А. А. Смирнов. Молекулярно-кинетическая теория металлов. М., Наука, 1966.

Днепропетровский инженерно-
строительный институт
Днепропетровский госуниверситет

Поступило в редакцию
25 апреля 1979 г.

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, В. В. БРУК

О ЛОКАЛЬНЫХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ. III

1. В предыдущей части [1] работы рассматривалась квантовомеханическая проблема существования связанных состояний частиц в слабых локальных полях (пространственно сосредоточенных) на основе метода интегральных уравнений. В данной части тот же метод применяется для исследования формирования связанных состоя-

ний в нелокальных полях. Ограничимся одномерным случаем движения частиц с обычным законом дисперсии. В отличие от слабых локализованных одномерных полей притяжения, в нелокальных полях связанные состояния частицы существуют не всегда.

2. Заметим, что граничные условия для волновой функции в некоторых случаях также можно трактовать как нелокальность поля. Например, условие непроницаемости, когда движение ограничено полупространством (в одном измерении — полупрямой), эквивалентно наличию бесконечно высокой потенциальной стенки [2], которую будем называть отражателем.

В слабом поле притяжения (мелкой или узкой потенциальной яме) связанное состояние может быть «вытеснено» отражателем. Найдем те критические параметры, при которых это происходит. Для решения такой задачи в интегральном уравнении для волновых функций связанных стационарных состояний (обозначения те же, что и в [1])

$$\Psi(x) = - \int dx' R(x, x'; E) U(x') \Psi(x') \quad (1)$$

функция Грина $R(x, x'; E)$ для полупространства $x > 0$ может быть построена на основе известной функции Грина неограниченного движения $R^0(x - x'; E)$ методом зеркального отражения: $R(x, x'; E) = R^0(x - x'; E) - R^0(x + x'; E)$. Используя явный вид [1] функции R^0 , имеем:

$$R(x, x'; E) = m(\hbar^2 \kappa)^{-1} [e^{-\kappa |x - x'|} - e^{-\kappa(x + x')}], \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}. \quad (2)$$

Переходя в уравнении (1) с функцией Грина (2) к пределу $\kappa \rightarrow 0$ и полагая при $x = L$ в первом приближении $\Psi = \text{const}$ внутри ямы шириной a , получаем критическое расстояние между отражателем ($x = 0$) и локальной областью притяжения ($x \approx L \gg a$), при котором вытесняется связанное состояние:

$$L_{\text{кр}} = (1/2) \kappa_0^{-1}, \quad \kappa_0 = (m/\hbar^2) \int U(x) dx. \quad (3)$$

К этому же результату приводит вариационный метод для интегральных уравнений с симметричным ядром [3], а также метод Фредгольма, позволяющий получить ответ с более высокой точностью (см. [1]).

Физический смысл соотношения (3) заключается в следующем. Влияние отражателя на связанное состояние в удаленной от него потенциальной яме — эффект чисто квантовый. Оно будет значительным только для расстояний L порядка радиуса «чувствительности» изолированной ямы κ_0^{-1} , определяющего проникновение частицы в классически недоступную область движения, поскольку соответствующая волновая функция слабо изменяется внутри ямы и простирается далеко за ее пределами, медленно убывая с расстоянием по закону $\Psi(x) \sim e^{-\kappa_0 |x - L|}$, $\kappa_0^{-1} \gg a$, $\hbar \kappa_0 = \sqrt{2m|E_0|}$, $|E_0|$ — энергия связи. К объяснению явления можно подойти и иначе: задача эквивалентна нахождению условия появления первого возбужденного уровня энергии в системе двух зеркально-симметричных ям на расстоянии $2L$.

Эффект исчезновения связанного состояния в рассматриваемых условиях находится в полном соответствии с полученным в [1] критерием существования связанных состояний в слабых локализованных полях: функция Грина (2) при $E \rightarrow 0$ оказывается конечной, в отличие от R^0 .

3. Перейдем теперь к другой нелокальной ситуации, которая возникает вследствие перепада предельных значений потенциала при стремлении координаты к бесконечности: $\Delta U = U(-\infty) - U(+\infty)$. Здесь интересно выяснить, какой критический скачок асимптотик поля $\Delta U > 0$ необходим для вытеснения связанного состояния частицы в слабой потенциальной яме. Будем считать, что ΔU мал (порядка энергии связи в локальном поле, т. е. при $\Delta U = 0$). Используя соответствующую функцию Грина в поле с прямоугольной ступенькой ΔU и применяя метод п. 2 (вычислительные детали опускаем), приходим к соотношению, имеющему простой физический смысл. Для вытеснения связанного состояния частицы в локальной области притяжения достаточно перепада предельных значений поля $\Delta U_{\text{кр}}$, лишь в четыре раза превышающего энергию связи в невозмущенной (локальной) яме:

$$\Delta U_{\text{кр}} = 4|E_0|. \quad (4)$$

Этот ответ согласуется с результатами для точно решаемых моделей прямоугольной ямы (см., например, [2], с. 89) и особого плавного потенциала, описанного в [4] на с. 602, и находится в соответствии со сделанным предположением о незначительности требуемого перепада.

4. Оба примера нелокальных полей можно считать предельными случаями более общей задачи о влиянии скачка потенциала на границе двух областей на связанное состояние в локализованном поле в одной из них. Расчет дает $L_{\text{кр}} = \kappa_0^{-1}/2 - q_{\text{кр}}^{-1}$, где $\hbar q_{\text{кр}} = \sqrt{2m\Delta U_{\text{кр}}}$, откуда формулы (3) и (4) вытекают соответственно при $\Delta U \rightarrow \infty$ и $L \rightarrow 0$. Рассмотренные свойства эффективно одномерного движения частиц относятся, например, к следующей трехмерной физической картине для плоскостных структур. Имеются две различные однородные среды с плоской границей раздела. В среде с меньшим значением потенциала есть область притяжения (слой). Если эта область расположена близко от границы, то при достаточно большом перепаде потен-

циала связанное состояние отсутствует. Отметим, что если она находится в среде с большим значением потенциала, то может возникнуть квазистационарное состояние, исследование которого представляет собой самостоятельную задачу.

Таким образом, с помощью метода интегральных уравнений (на основе резольвенты гамильтониана и функций Грина) весьма удобно анализировать роль различных факторов (размерность пространства, вид закона дисперсии, наличие областей отталкивания, нелокальный характер поля и т. п.) в проблеме существования связанных состояний [1, 3, 5, 6]. Нужно сказать, что в книгах по квантовой механике метод интегральных уравнений при изучении связанных стационарных состояний не излагается (он фигурирует лишь в теории рассеяния), хотя является, видимо, наиболее эффективным, особенно для исследования чисто квантового явления вытеснения (зарождения) связанных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. В. Ульянов, В. В. Брук. Изв. вузов СССР, Физика, № 3, 123, 1979.
[2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
[3] В. В. Ульянов, А. Г. Педан, Ю. С. Довман. Изв. вузов СССР, Физика, № 6, 148, 1977. [4] Ф. М. Морс, Г. Фешбах. Методы теоретической физики, 2, М., ИЛ, 1960. [5] И. М. Лифшиц. УФН, 83, 617, 1964. [6] Л. В. Чеботарев. Изв. вузов СССР, Физика, № 4, 140, 1978.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
3 мая 1979 г.

УДК 537.226.537.311.322

Л. Н. ВИХОР

К ТЕОРИИ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В КВАНТУЮЩИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Магнитосопротивление электронов при рассеянии на ионизированных примесях в квантующих магнитных полях рассматривалось в ряде работ [1, 2, 3, 4], однако в них делалось предположение, что $\xi = l/r_0 \gg 1$ (r_0 — радиус действия потенциала; l — магнитная длина), т. е. потенциал является короткодействующим, в то время как в полупроводниках обычно реализуется случай $\xi \approx 1$. Кубо с сотрудниками [5] предложил для решения этой задачи использовать своеобразную модификацию метода парциальных фаз, благодаря чему оказалось возможным отказаться от ограничения, накладываемого на параметр ξ . В настоящей заметке дается простой вывод электропроводности через сдвиги фаз.

Рассмотрим гамильтониан электрона в поле статистически распределенных рассеивателей

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left[\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \sum_{\kappa=1}^{N_s} u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\kappa}) = \hat{H}_0 + U, \quad (1)$$

где $u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\kappa})$ — потенциальная энергия электрона в поле примеси, находящейся в \mathbf{R}_{κ} ; N_s — число примесей; $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — векторный потенциал, соответствующий магнитной индукции $B_x = B_y = 0$, $B_z = B$. Тензор электропроводности определяется формулой Кубо [5]

$$\sigma_{jk}(\omega) = \frac{2}{V} \int_0^{\infty} dt e^{-i\omega t} \int_0^{\beta} d\lambda \langle j_j(-i\hbar\lambda) j_k(t) \rangle, \quad (2)$$

где j — одночастичный оператор плотности тока, $\beta = \frac{1}{k_0 T}$. В статическом случае ($\omega = 0$) (2) легко преобразовать к виду [5]

$$\sigma_{jk} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi V} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \text{Sp} \left\{ A(E) v_j A(E) v_k \right\}, \quad (3)$$

где v_j — оператор компоненты скорости электрона, а спектральная функция $A(E)$ выражается через скачки запаздывающих и опережающих одночастичных функций Грина следующим образом:

$$A(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} i^{-1} [G(E - i\eta) - G(E + i\eta)] = i^{-1} [G^-(E) - G^+(E)] = 2\pi\delta(E - \hat{H}); \quad (4)$$

$$G^{\pm}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} (E - \hat{H} \mp i\eta)^{-1}. \quad (5)$$

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	3
О влиянии размытия границы металла на свойства электронов проводимости//Изв. вузов, Физика. - 1974. - № 5. - С.135-136. - Соавт.: Нгуен Дык Тьен	4
О теплоемкости двумерных квантовых идеальных газов // Изв. вузов, Физика. - 1975. - № 1. - С. 153-154. - Соавт.: Соколов С.С.	7
О квазиклассическом разложении решений уравнения Шредингера для степенного потенциала//Изв. вузов, Физика. - 1975. - № 3. - С. 126-127. . .	10
К учету влияния размытия границ на электронные свойства металлов // Изв. вузов, Физика. - 1975. - № 3. - С. 147-149. Соавт.: Кальной С.Е. . . .	13
О термодинамике парагаза // Изв. вузов, Физика. - 1975. - № 10. - С. 152-153. - Соавт.: Снапиро И.Б.	17
О влиянии размытия границы металла на магнитопленочные осцилляции магнитной восприимчивости // Изв. вузов, Физика. - 1976. - № 7. - С. 126-127. - Соавт.: Кальной С.Е.	20
О фазовых переходах в бозе-газе при анизотропных законах дисперсии // Изв. вузов, Физика. - 1976. - № 9. - С.120-122. - Соавт.: Василева М.И. . . .	23
О нефункциональном подходе в ВКБ-методе // Изв. вузов, Физика. - 1976. - № 11. - С. 148-150. - Соавт.: Халявин А.И.	27
О локальных связанных состояниях // Изв. вузов, Физика. - 1977. - № 6. - С. 148-150. - Соавт.: Педан А.Г., Довман Ю.С.	31
О нелинейных нулевых колебаниях // Изв. вузов, Физика. - 1977. - № 9. - С. 135-137. - Соавт.: Кичигина Е.В., Перельмутер М.С.	35
О квантовых частотах // Изв. вузов, Физика. - 1977. - № 9. - С. 152-154. - Соавт.: Бабенко В.Д.	39
О нефункциональном подходе в ВКБ-методе. II // Изв. вузов, Физика. - 1978. - № 1. - С. 143-145. - Соавт.: Халявин А.И.	43
О термодинамике парагаза. II // Изв. вузов, Физика. - 1978. - № 3. - С. 145-147. - Соавт.: Горенцвейг В.И.	47
О локальных связанных состояниях. II // Изв. вузов, Физика. - 1979. - № 3. - С. 123-125. - Соавт.: Брук В.В.	51
О термодинамике парагаза. III // Изв. вузов, Физика. - 1979. - № 5. - С. 107-108. - Соавт.: Горенцвейг В.И.	55
О локальных связанных состояниях. III // Изв. вузов, Физика. - 1980. - № 10. - С. 97-99. - Соавт.: Брук В.В.	58

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов

ЗБІРКА ОГЛЯДІВ І СТАТЕЙ З КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

(зі співавторами та без)

Частина п'ята

Російською мовою

Електронне видання

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

**Издания кафедры теоретической физики имени
академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых)**
К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов. НОВЫЕ
КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ
ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ (+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ. Ч.2 (+CD). –
2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.
- 7-8. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВА-
НИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч. 1, 2 (+CD). – 2012.
- 9-12. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1-4. – 2002, 2011.
- 13-14. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ.
Ч. 1, 2. – 2011.
15. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. Ч. 5. –
2011.
- 16-17. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ. Ч. 1-2. – 2011.
- 18-20. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ. Ч. 3-5. – 2012.
21. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
22. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
23. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч.3. –
2004.
24. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В
НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ С ПРИМЕСНЫМИ
СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
25. А.М.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN
NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES
OF ELECTRONS. – 2008.
26. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ
КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА
І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001,2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОИСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. – 2003.
- 15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).
23. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. В.Г.ПЕСЧАНСКИЙ НА ТЕОРКАФЕДРЕ. – 2011.
24. В.В.Ульянов. К 80-ЛЕТИЮ В.Г.ПЕСЧАНСКОГО. – 2011 (CD).

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
 - Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С., Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Гапон Э.В, Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. I I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
 - Ч.V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
 - Ч.VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П., Креснин А.А., Манжелей В.Г., Пустовалов В.В., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
 - Ч.VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
 - Ч.X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2003.
 - Ч.XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П., Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
 - Ч.XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З., Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2008.
 - Ч.XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
 - Ч.XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В., Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
 - Ч.XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П., Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
(Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
РОДОСЛОВНАЯ НАШЕЙ СЕМЬИ. – 2004.
15. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ (2-е изд., доп.). – 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНИЧ (+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова. Рисунки отца. – 2011 (CD).
28. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ ЗАВАЛИШИН. – 2011 (CD).
29. В.В.Ульянов
МОЯ МУЗЫКАЛЬНАЯ ИСТОРИЯ (+DVD). – 2012.
30. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2012.

PHYSICS REPORTS

A Review Section of Physics Letters

NEW METHODS IN THE THEORY OF QUANTUM SPIN SYSTEMS

V. N. KRAVCHUK AND G. A. KRAVCHUK

Volume 274 Number 1

July 1992

ISSN 0368-0190

ELSEVIER

Available online at ScienceDirect

THEORETICAL AND MATHEMATICAL PHYSICS

Теоретическая и математическая физика

ТОМ 148 № 1 ЯНВАРЬ 2006



УКРАЇНСЬКИЙ ФІЗИЧНИЙ ЖУРНАЛ

1 2010
Том 58
Випуск

UKRAINIAN JOURNAL OF PHYSICS



Published by Academic Press

THE PHYSICAL REVIEW

Том 124, Выпуск 3

September 2003

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ТОМ 130
2011



"НАУКА"
МАК "НАУКА/ИНТЕРПЕРИОДИКА"

ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

ТОМ 9

5 - 100

Физика низких температур

Специальный выпуск,
посвященный памяти И. М. Лифшица.
Под редакцией В. А. Фокина

Том 23
Выпуск 1
1997

МИНИСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Вісник Харківського Національного Університету імені В. Н. Каразіна

№ 9

Харків 2

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНАЯ ОТПРАВКА

2-75

ИЗДАТЕЛЬСТВО
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

PHYSICAL REVIEW B

CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS

Volume 128, Number 1
January 2004

ISSN 1098-0179
(USPS 774-040)

Journal of Experimental and Theoretical Physics

English Translation of Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki

Editor in Chief
Alexander Z. Akhiezer



PLEIADES PUBLISHING

ISSN 1063-4269

Distributed by Springer

LOW TEMPERATURE PHYSICS

Translated from Russian. English Publication

It is a translation of the journal 'Fizika Nizkikh Temperatur' (Low Temperature Physics, Vol. 36, No. 1, 1997) published in 1997.

Russian Physics Journal

ISSN 1063-4269
Volume 52, Number 1, January 2008

